

Tesis de Posgrado

Medición y caracterización del pico de captura al continuo en colisiones de iones con blancos gaseosos

Pregliasco, Rodolfo Guillermo

1993

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ciencias Físicas de la Universidad de Buenos Aires

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales y de maestría de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en digital.bl.fcen.uba.ar. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in digital.bl.fcen.uba.ar. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:

Pregliasco, Rodolfo Guillermo. (1993). Medición y caracterización del pico de captura al continuo en colisiones de iones con blancos gaseosos. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.

http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2562_Pregliasco.pdf

Cita tipo Chicago:

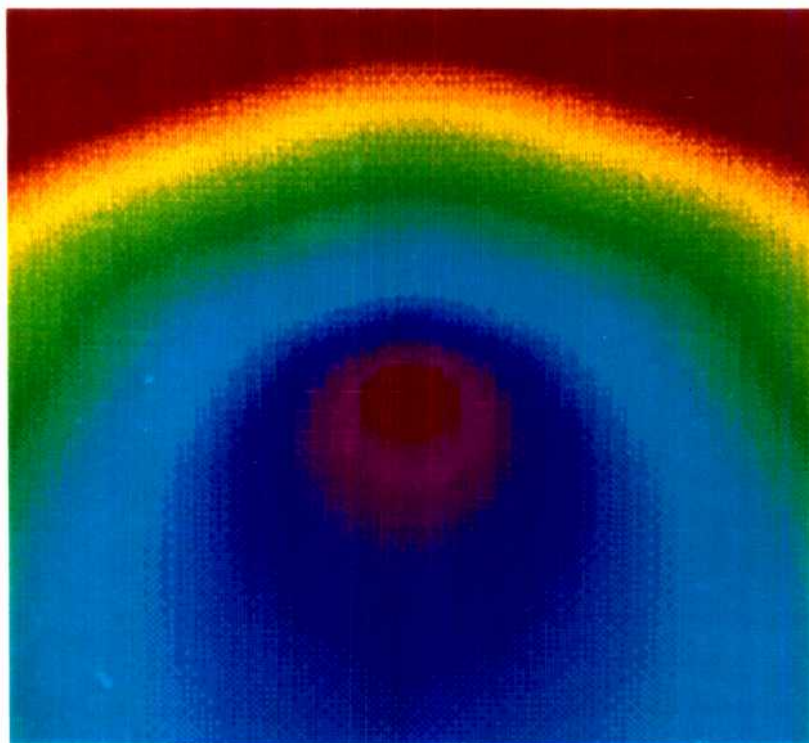
Pregliasco, Rodolfo Guillermo. "Medición y caracterización del pico de captura al continuo en colisiones de iones con blancos gaseosos". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 1993.

http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2562_Pregliasco.pdf

UNIVERSIDAD NACIONAL DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
Tesis Doctoral

Medición y Caracterización
del
Pico de Captura al Continuo
en
Colisiones de Iones con Blancos Gaseosos

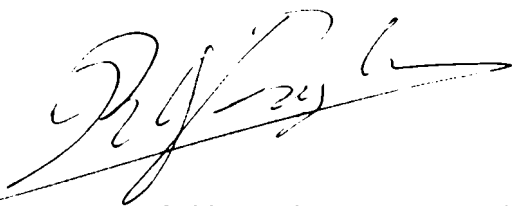
Autor: **Rodolfo Guillermo Pregliasco**




División Colisiones Atómicas — Centro Atómico Bariloche
8400, S. C. de Bariloche, Rio Negro, Argentina.

~ Verano 1993 ~

Tesis
2562



Tesista: Rodolfo Guillermo Pregliasco



Director: Wolfgang Meckbach

Consejero: Alejandro Fendrik

Para Alicia, mi dulce popotito.

Nuestro pueblecito ha festejado ayer al señor Giovancarlo Trombetti, que en treinta años de trabajo ha grabado por sí solo y sin ayudantes la ópera Aida del maestro Giuseppe Verdi.

Empezó cuando era casi un niño, cantando ante el micrófono de su magnetofón el papel de Aida, después el de Amneris, después el de Radamés. Uno tras otro, cantó y grabó todos los papeles. Y también los coros. Como el coro de los sacerdotes tenía que ser de treinta cantantes, lo tuvo que cantar treinta veces. Después estudió todos los instrumentos, del violín al bombo, del fagot al clarinete, del la trompeta al cuerno inglés, etcétera. Grabó las partes una a una, después las fundió en una cinta común para obtener el efecto de la orquesta.

Todo este trabajo lo ha hecho en un sótano alquilado con este fin, lejos de su domicilio. A la familia le decía que iba a hacer horas extraordinarias. Y en cambio iba a hacer Aida. Hizo los ruidos de los elefantes, los de los caballos, los aplausos al final de las arias más famosas. Para hacer el aplauso del final del primer acto, aplaudió él solo, durante un minuto, tres mil veces, porque había decidido que al espectáculo asistirían tres mil personas, de las cuales cuatrocientas dieciocho debían gritar: —¡Bravo!—, ciento veintiuna: —¡Estupendo!—, treinta y seis: —¡Queremos un bis!— y doce, en cambio: —¡Animales! ¡Esfumaos!—.

Y ayer, como he dicho, cuatro mil personas, agolpadas en el teatro municipal, han asistido a la primera audición de la excepcional ópera. Al final casi todos estaban de acuerdo en decir: —¡Extraordinario! ¡Parece mismamente un disco!—.

Gianni Rodari, Cuentos escritos a máquina.

Resumen

La forma del pico de Captura Electrónica al Continuo (ECC) constituye una información importante para estudiar la evolución de un electrón en dos centros coulombianos. A partir de la introducción del desarrollo paramétrico y el método estándar de procesamiento por Meckbach, Nemirovsky y Garibotti en 1981, se realizaron numerosos esfuerzos para caracterizar cuantitativamente la asimetría del pico de ECC con dispares resultados. En este trabajo estudiamos los problemas que involucra la aplicación del método estándar.

Realizamos mediciones de la emisión electrónica en colisiones de H^+ y Hc^{2+} sobre un blanco gaseoso de He con energías entre 50 y 200 keV/amu. Relevamos exhaustivamente la estructura de la sección eficaz doblemente diferencial en las proximidades del pico de ECC ($v' < 0.3$ au, $-1.5^\circ \leq \theta \leq 10^\circ$) poniendo especial cuidado en la normalización angular de los espectros.

Para analizar la estructura del pico de ECC proponemos un método que consiste en (i) desarrollar la sección eficaz en término de funciones angulares, (ii) aplicar un método para determinar la velocidad del proyectil v_i , (iii) remover la divergencia dividiendo la medición por una función apropiada, y (iv) ajustar el resultado obtenido por rectas. Demostramos que este enfoque resuelve los problemas que presenta el método de procesamiento estándar.

En los resultados de nuestras mediciones distinguimos la existencia de dos regímenes para la ionización según que el módulo de la velocidad electrónica sea mayor o menor que la velocidad del proyectil.

Finalmente, comparamos los resultados experimentales con los cálculos de las aproximaciones CDW y CDW-EIS. Ambas teorías subestiman la asimetría divergente. El cálculo de CDW describe cualitativamente bien la parte no divergente del pico de ECC.

Abstract

The shape of the Electron Capture to the Continuum cusp (ECC) provides important information on the electron evolution between two coulomb centers. Since the introduction of the parametric series by Meckbach, Nemirovsky and Garibotti in 1981, many efforts have been done for the quantitative characterization the ECC cusp asymmetry. However these results are spread and unsatisfactory. In this work, we study the difficulties of this standard method.

We measured the electron emission for the collision of H^+ and He^{2+} on He , with energies between 50 and 200 keV/amu. We exhaustively scanned the structure of the double differential cross section in the ECC cusp proximity ($v' < 0.3$ au, $-1.5^\circ \leq \theta \leq 10^\circ$). We take special care in the angular normalization of the spectra.

For analyzing the ECC cusp structure, we propose a method that consists in (i) developing the cross section in terms of angular functions, (ii) applying a novel method for the determination of the projectile velocity v_i , (iii) removing the divergence by dividing the measurement data by a proper function and (iv) fitting the obtained result by lineal regressions. We demonstrate that, in this way, the difficulties and shortcomings presented in the standard data processing method are overcome.

In our experimental results we distinguish the existence of two regimes for the ionization depending on whether the module of the electron velocity is greater or smaller than the projectile velocity.

Finally, we compare our experimental results with CDW and CDW-EIS calculations. Both theories underestimate the divergent asymmetry. The CDW theory have a good qualitatively agreement in the non-divergent part of the ECC cusp.

Indice

Resumen	i
Abstract	ii
Introducción	1
0.1 Notación	5
1 El pico de ECC: Estudios Realizados	7
1.1 Desarrollo Histórico hasta 1981	8
1.1.1 Los Antecedentes	8
1.1.2 El Descubrimiento	10
1.1.3 ¿Un mecanismo?	13
1.1.4 Mediciones	13
1.1.5 La asimetría	16
1.1.6 El desarrollo Paramétrico y el Método Estándar	17
1.2 Las mediciones	20
1.2.1 Mediciones a 0°	20
1.2.2 Mediciones alrededor de 0°	30
1.3 Los desarrollos teóricos	35
1.3.1 Serie de Born	36
1.3.2 Métodos de Onda Distorsionada	39
1.3.3 Trayectorias Clásicas	42
1.3.4 Comparación con Resultados Experimentales	45
1.4 Cuestiones Adicionales	48
1.4.1 Continuidad con la Captura	48
1.4.2 U_p fenómeno cuántico	50

1.4.3	Captura al Continuo de Projectiles Neutros	51
2	Método Experimental	53
2.1	El Equipo	53
2.1.1	El Haz	55
2.1.2	El espectrómetro	58
2.1.3	Enfoque del Espectrómetro	60
2.1.4	Electrones Rydberg	61
2.2	La Medición	64
2.2.1	El Sistema de Adquisición de Datos	64
2.2.2	La Normalización Angular	64
2.2.3	El Relevamiento de la SEDD	65
3	Parametrización en Funciones Angulares y Método de Evaluación	69
3.1	Parametrización en funciones angulares	70
3.2	Remoción de la Divergencia	70
3.3	Determinación de v_i	75
3.4	Estabilidad del Método	78
3.5	Relación con otros Métodos	80
3.6	Normalización de las Funciones Angulares	81
4	Resultados y Conclusiones	82
4.1	Resultados	82
4.1.1	El Rendimiento	85
4.1.2	La Función Angular Divergente $b_{\theta'}$	86
4.1.3	La Función Angular Convergente $a_{\theta'}$	89
4.1.4	Reconstrucción de la SEDD	94
4.2	Conclusiones	96
	Agradecimientos	99
	Referencias	101

Lista de Figuras

Figura de Tapa: $H^+ \rightarrow He$ a 200 keV. Curvas de Nivel del Pico de ECC coloreadas según la altura (ídem figura 4.8c).

0.1	SEDD $C^{6+} \rightarrow H$ 20 ua	3
0.2	Coordenadas de Jacobi	5
1.1	Lomo a 10° (Rudd y Jorgensen 1963)	9
1.2	Primer Pico (Crooks y Rudd 1970)	12
1.3	Cálculo 2° de Born (Shakeshaft y Spruch 1978a)	16
1.4	Volumen de resolución del detector	19
1.5	Parámetros de Bohr	22
1.6	Rendimiendo del pico	22
1.7	Rendimiendo <i>vs</i> Z_P	24
1.8	β <i>vs</i> v_i : Iones Livianos	25
1.9	β <i>vs</i> v_i : Iones Pesados	25
1.10	Transmisión angular del equipo	27
1.11	Dependencia de B_{nl} en v_i y θ_0	29
1.12	Elston 1987: Equipo y Resultados	32
1.13	(Gulyás <i>et al</i> 1989) Medición alrededor de 0°	33
1.14	Cálculo clásico (Reinhold y Olson 1989).	43
1.15	Probabilidad de Ionización <i>vs</i> t (Bandarage y Parson 1990).	44
1.16	Velocidad final electrónica en los diferentes regímenes (Bandarage y Parson 1990)	45
1.17	B_{00} para $H^+ \rightarrow He$. Resultados teóricos y experimentales	46
1.18	β para $H^+ \rightarrow He$. Resultados teóricos y experimentales	47
1.19	Captura al continuo de Atomos Neutros (Barrachina 1990)	52

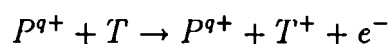
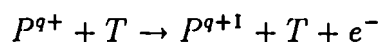
2.1	Diagrama general del equipo	54
2.2	Trayectorias en el imán deflector	55
2.3	Estabilidad de campo del imán deflector	57
2.4	Verificación de la Estabilidad del imán deflector	57
2.5	Diagramas del Espectrómetro	59
2.6	Transmisión del espectrómetro en la dirección $\hat{\phi}$	62
2.7	Cambios introducidos por la grilla en \mathcal{G}	62
2.8	Relevamiento de la SEDD	66
2.9	Medición de la SEDD	68
3.1	Q/U_{00} : Superficie y Curvas de Nivel	73
3.2	Q/U_{00} : Cortes a $\theta' = cte$	74
3.3	Funciones Angulares $A_{\theta'}$ y $B_{\theta'}$	74
3.4	F/U_{00} : dependencia en v_i^*	77
3.5	Q/U_{00} : dependencia en v_i^*	77
3.6	Estabilidad frente a variaciones de v_i^*	79
3.7	Estabilidad frente a variaciones de θ_0^*	79
4.1	Q/v^3 : Curvas de Nivel de todas la mediciones	83
4.2	Q/U_{00} : Curvas de Nivel de todas la mediciones	84
4.3	$b_{\theta'}$: Resultados Experimentales	87
4.4	$b_{\theta'}$: Comparación con los Cálculos	88
4.5	$a_{\theta'}$: Resultados Experimentales	91
4.6	$a_{\theta'}$: Superficie	92
4.7	$a_{\theta'}$: Resultados de los Cálculos	93
4.8	$d\sigma/dv$: Curvas de Nivel Deconvolucionadas	95

Lista de Tablas

1.I Experimentos hasta 1981	14
1.II Experimentos a 0°	21
1.III Rendimiento vs. v_i a altas velocidades	23
1.IV Experimentos alrededor de 0°	30
4.I Valores obtenidos de v_i^* y Y	85

Introducción

Cuando un ion colisiona contra un átomo pueden tener lugar una serie de procesos inelásticos. Dichos procesos pueden involucrar el cambio de estado de uno o más electrones (electrones activos) del átomo blanco o del proyectil. Los procesos básicos con un electrón activo son: excitación e ionización del átomo blanco, excitación e ionización del proyectil y captura electrónica. En este último caso, un electrón del blanco es transferido a un estado ligado del proyectil. La ionización es el proceso más probable a altas velocidades de colisión y es la principal contribución a la pérdida de energía del ion. Podemos esquematizarlo de la forma:



En el primer caso hablaremos de ionización del proyectil y en el segundo de ionización del blanco, según sea el origen del electrón activo. En particular, si el ion incidente carece de electrones, sólo puede haber ionización del blanco, proceso al que dedicaremos mayor atención.

Resulta de utilidad introducir el parámetro de Bohr:

$$\eta = 2 \frac{v_i}{v_e} \quad (0.1)$$

donde v_i y v_e representan la velocidad del ion y una velocidad característica del estado inicial del electrón respectivamente. Según el valor que toma η se distinguen tres regímenes en el proceso:

- En el caso en que $\eta \ll 1$, la colisión resulta suficientemente lenta como para que la función de onda del electrón se acomode adiabáticamente al potencial del

proyectil y del blanco. En este régimen de bajas velocidades resulta apropiada una descripción en términos de orbitales moleculares.

- Por el contrario, si $\eta \gg 1$, el paso del proyectil es tan rápido que la acción¹ electrónica es muy pequeña y pueden utilizarse desarrollos perturbativos en los potenciales del proyectil y del blanco.
- Si $\eta \approx 1$, nos encontramos en el régimen de velocidades intermedias, en el cual la ionización no resulta ni súbita ni adiabática. La descripción de este régimen es sumamente compleja.

En la presente tesis, discutiremos sobre la ionización del blanco a velocidades altas e intermedias.

Para caracterizar el proceso, utilizaremos la sección eficaz doblemente diferencial (SEDD) $d\sigma/dv$ que representa la mayor información que puede obtenerse midiendo los electrones despedidos en la colisión. En la figura 0.1 se pueden observar las características sobresalientes de la SEDD para una ionización del blanco. Ellas son:

- La existencia de un máximo para la emisión electrónica en la región²

$$|\mathbf{v} - \mathbf{v}_i| = v_i$$

donde \mathbf{v} y \mathbf{v}_i representan la velocidad del electrón y la del proyectil respectivamente.

A esta estructura se la denomina *Esfera Binaria* ya que se encuentra centrada en la exacta conservación del impulso y la energía en una colisión binaria entre el proyectil y un electrón libre inicialmente en reposo.

- Un pico divergente en $v = 0$ debido al potencial coulombiano del blanco que está ionizado en el canal de salida. A este pico lo denominaremos *pico de electrones lentos*.
- Otro pico divergente en $\mathbf{v} = \mathbf{v}_i$ debido a la interacción con el potencial coulombiano del proyectil. A este pico lo llamaremos *pico de Transferencia Electrónica al Continuo* (ETC)³.

¹Podemos definir la *acción* como el producto $E_i \cdot \Delta t$, donde E_i es la energía electrónica del estado inicial y Δt el tiempo característico de la interacción con el proyectil

²En la expresión despreciamos la energía de ligadura del electrón en el estado inicial

³Electron Transfer to the Continuum

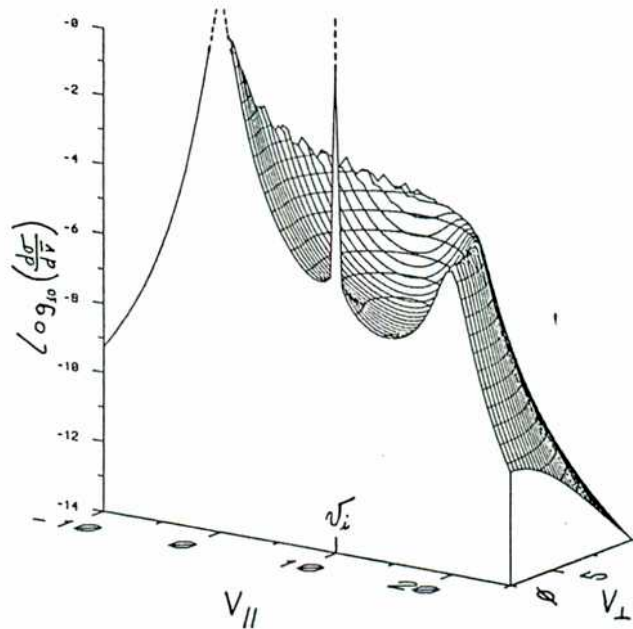


Figura 0.1: Sección eficaz doble-diferencial de la colisión $C^{6+} \rightarrow H$ a 20 ua de velocidad. $v_{||}$ y v_{\perp} indican las componentes paralela y perpendicular de la velocidad del electrón respecto de la dirección de incidencia.

El pico de ETC se observa tanto en la ionización del proyectil, como en la del blanco. Para diferenciar ambos procesos introduciremos las denominaciones *Pérdida Electrónica al Continuo* (ELC) ⁴ y *Captura Electrónica al Continuo* (ECC) ⁵ que designan respectivamente la ionización del proyectil y del blanco.

Los picos de captura y de pérdida electrónica al continuo son ambos producidos por la presencia del potencial coulombiano del proyectil, pero provienen de evoluciones dinámicas muy diferentes. En el caso de ELC, la transferencia de impulso al electrón es muy baja y su evolución está dominada por el potencial del proyectil ya que el blanco permanece neutro en el canal de salida, si consideramos sólo los procesos de un electrón activo. En cambio, en el proceso de ECC, el electrón inicialmente ligado al blanco pasa a un estado del continuo del proyectil. La transferencia de impulso es comparable a la que ocurre en un proceso de captura a un estado ligado y el electrón evoluciona

⁴Electron Loss to the Continuum

⁵Electron Capture to the Continuum

entre dos centros coulombianos: el proyectil y el ion residual del blanco. Aquí radican las dificultades para describir el proceso de ECC: es un problema de tres cuerpos y, además, los potenciales son todos coulombianos. Estas dificultades son las que vuelven interesante al fenómeno: es un excelente desafío para las teorías de ionización y sirve indirectamente para verificar aquellas de captura a estados altamente excitados del proyectil, en las que el estado final resulta similar.

Desde el punto de vista experimental, el carácter divergente del pico plantea el siguiente inconveniente: del proceso de medición siempre se obtiene la sección eficaz *convolucionada* con la función transmisión del equipo detector. Al ser el pico divergente, la convolución nunca puede ser despreciada y como resultado la forma de los espectros contiene información de la sección eficaz *y a la vez* de la forma en que el equipo observa el fenómeno. Por consiguiente es necesario modelizar el sistema de detección con el fin de extraer la información física subyacente en los espectros. Esta es una de las razones por la cual los resultados experimentales obtenidos por diferentes grupos aplicando el método estándar (sección 1.1.6) no pasan de un acuerdo cualitativo acerca de la forma del pico de ECC.

En la presente tesis abordaremos el problema que implica la medición del pico de Captura al Continuo a energías altas e intermedias, así como su caracterización. También describiremos los diferentes desarrollos teóricos planteados hasta la fecha y compararemos con nuestras mediciones.

Para analizar la estructura del pico de ECC propondremos un método que consiste en (i) desarrollar la sección eficaz en término de funciones angulares, (ii) aplicar un método para determinar la velocidad del proyectil v_i , (iii) remover la divergencia dividiendo la medición por una función apropiada, y (iv) ajustar el resultado obtenido por rectas. Demostraremos que este enfoque resuelve las dificultades que presenta el método de procesamiento estándar.

En los resultados de nuestras mediciones distinguimos la existencia de dos regímenes para la ionización según que el módulo de la velocidad electrónica sea mayor o menor que la velocidad del proyectil.

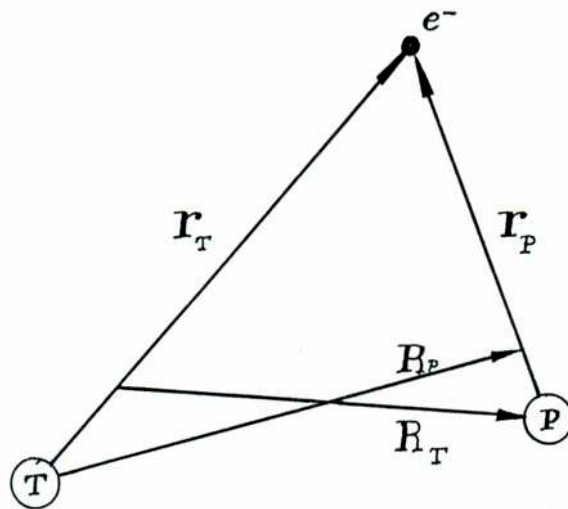


Figura 0.2: Coordenadas de Jacobi.

0.1 Notación

En esta sección introducimos la nomenclatura que vamos a utilizar para describir la ionización. La intención no es exponer en detalle la teoría de colisiones, sino uniformar la notación y expresar algunas fórmulas básicas que utilizaremos mas adelante. A menos que se indique expresamente, se utilizarán unidades atómicas en todo el trabajo.

El electrón activo en el estado inicial se modela con un estado hidrogénico de carga efectiva Z_T . El proyectil incide con una carga Z_P . Las masas del núcleo blanco y del proyectil las denominaremos M_T y M_P respectivamente. La interacción del electrón con el núcleo blanco y el proyectil estará determinada por los potenciales V_T y V_P .

Describiremos el problema utilizando las coordenadas de Jacobi (\mathbf{r}_T , \mathbf{R}_T) y (\mathbf{r}_P , \mathbf{R}_P) que mostramos en la figura 0.2. En la notación de Macek y Shakeshaft (1980) \mathbf{r}_T y \mathbf{r}_P son los vectores posición del electrón relativo al núcleo del blanco y al proyectil respectivamente. \mathbf{R}_T es el vector posición del proyectil relativo al centro de masa del sistema ($e^- - T$) y \mathbf{R}_P es el vector posición del centro de masa del sistema ($e^- - P$) respecto del blanco. Sus impulsos conjugados los notaremos (\mathbf{k}_T , \mathbf{K}_T) y (\mathbf{k}_P , \mathbf{K}_P) respectivamente. La masa asociada a \mathbf{K}_T será:

$$\mu = \frac{M_P(1 + M_T)}{1 + M_P + M_T} \quad (0.2)$$

La velocidad inicial del proyectil en el sistema del laboratorio será $\mathbf{v}_i = \mathbf{K}_T/\mu$.

El impulso final del proyectil estará caracterizado por \mathbf{K}_{T_f} . Definiremos el vector transferencia de impulso como:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{K}_{T_i} - \mathbf{K}_{T_f} \quad (0.3)$$

Si tenemos N_i electrones en el blanco con la misma función de onda, la matriz de transición se relaciona con la sección eficaz mediante la expresión:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\mathbf{v}} \right) = \frac{d\sigma}{d\mathbf{k}_T} = \frac{(2\pi)^4 N_i}{v_i^2} \int |t_{fi}|^2 \delta(\hat{\mathbf{Q}} \cdot \hat{\mathbf{v}}_i - \frac{Q_0}{Q}) \frac{dQ}{Q} \quad (0.4)$$

donde hemos despreciado términos del orden de $1/M_{T,P}$. Q_0 es el mínimo momento transferido:

$$Q_0 = \frac{1}{v_i} \frac{k_T^2 + Z_T^2}{2} \quad (0.5)$$

Para una información más detallada sobre estas expresiones, véase McDowell y Coleman (1970) y Barrachina (1990).

Llamaremos $\mathbf{v} = \mathbf{k}_T$ la velocidad final del electrón. La dirección $\hat{\mathbf{z}} = \hat{\mathbf{v}}_i$ corresponde a la de incidencia del proyectil. Ocasionalmente hablaremos de 'adelante' y 'atrás' refiriéndonos respectivamente a las direcciones $+\hat{\mathbf{z}}$ y $-\hat{\mathbf{z}}$. Las componentes perpendicular y paralela a $\hat{\mathbf{z}}$ de la velocidad electrónica \mathbf{v} las designamos como v_{\perp} y v_{\parallel} , en ese orden. Las variables primadas v' y θ' son el módulo y el ángulo azimutal de \mathbf{v} en el sistema del proyectil.

Capítulo 1

El pico de ECC: Estudios Realizados

SAGREDO.- Temeridad extrema me ha parecido siempre la de aquellos que quieren hacer de la capacidad humana, medida de cuanto puede y sabe operar la naturaleza, ya que, bien al contrario, no hay efecto alguno en la naturaleza, por mínimo que este sea, a cuya entera comprensión puedan llegar los más especulativos ingenios. Esta vana presunción de entenderlo todo no puede tener mas principio que el de no haber comprendido nunca nada, porque si alguien hubiese intentado entender perfectamente una sola cosa, y hubiese gustado verdaderamente de cómo está hecho el saber, conocería cómo, de la infinidad de las otras conclusiones, ninguna abarca.

**Galileo Galilei, Diálogo sobre los Sistemas Máximos:
Jornada Primera.**

En este capítulo repasaremos los trabajos que se han realizado acerca del pico de ECC. Hemos elegido hacerlo en forma más o menos histórica hasta el año 1981, para luego desarrollar desde una perspectiva actual aquellas cuestiones experimentales y teóricas que han sido planteadas. El período hasta 1981 resulta importante porque las ideas principales y el lenguaje en que se expresan han sido planteados entonces. Además en ese mismo año fue presentado el desarrollo paramétrico de la sección eficaz de ETC (Meckbach, Nemirovsky y Garibotti 1981), que hasta hoy resulta la herramienta estándar para caracterizar el pico de ETC. Finalmente, cerramos el capítulo describiendo algunas cuestiones periféricas que consideramos interesantes.

1.1 Desarrollo Histórico hasta 1981

1.1.1 Los Antecedentes

Para comprender el contexto del descubrimiento del pico de transferencia al continuo, comenzamos con un repaso de los trabajos sobre ionización publicados hasta 1970.

El primer cálculo de ionización lo realizó J. J. Thomson (1912) utilizando la expresión desarrollada por Rutherford para una dispersión clásica elástica. El cálculo fue perfeccionado teniendo en cuenta la distribución de velocidades en el estado inicial del electrón, así como su energía de ligadura. A esta descripción se la llamó *Binary Encounter Approximation*¹ y fue utilizada para calcular las secciones eficaces doble-diferenciales de ionización (Bonsen y Vriens 1970).

Sin embargo para atacar este problema es necesario un tratamiento cuántico, aunque según L. H. Thomas: "... a correct quantum theory calculation has not to explain any large numerical discrepancy."² (Thomas 1927a). El primer cálculo cuántico de ionización se realizó en 1953 (Bates y Griffing) y se hallaba en el límite de lo computable en la época. Se utilizaba la aproximación de primer orden de Born tal como fuera desarrollada por Bethe (1930) y Massey y Mohr (1933). Se representaba al electrón en el estado final con una función de onda coulombiana de energía positiva centrada en el ion residual.

Para realizar mediciones de la estructura doblemente diferencial resulta fundamental tener un buen vacío ($\approx 10^{-7}$ torr) de manera que el camino libre medio de los electrones a detectar sea por lo menos del orden de las dimensiones del equipo. Debido a este tipo de dificultades, recién en 1963 (Kuyatt y Jorgensen) se mide la primer SEDD en colisiones de $H^+ \rightarrow H_2$. Estas mediciones fueron mejoradas y extendidas por el mismo grupo (Rudd y Jorgensen 1963, Rudd et al 1966) a los sistemas $He^+ \rightarrow H_2$ y $H^+ \rightarrow He$ entre 50 keV y 300 keV, midiendo a los electrones emitidos con energías entre 1 eV y 500 eV y a ángulos entre 10° y 160° .

El acuerdo de las teorías clásicas y cuánticas con los experimentos era en general bueno a pesar de que la energía de colisión era relativamente baja para aplicar la aproximación de Born. Se observaban claramente la cuesta del pico de electrones lentos y la esfera binaria.

¹Aproximación de encuentro binario.

²"... un cálculo cuántico correcto no tiene que explicar una gran discrepancia numérica"

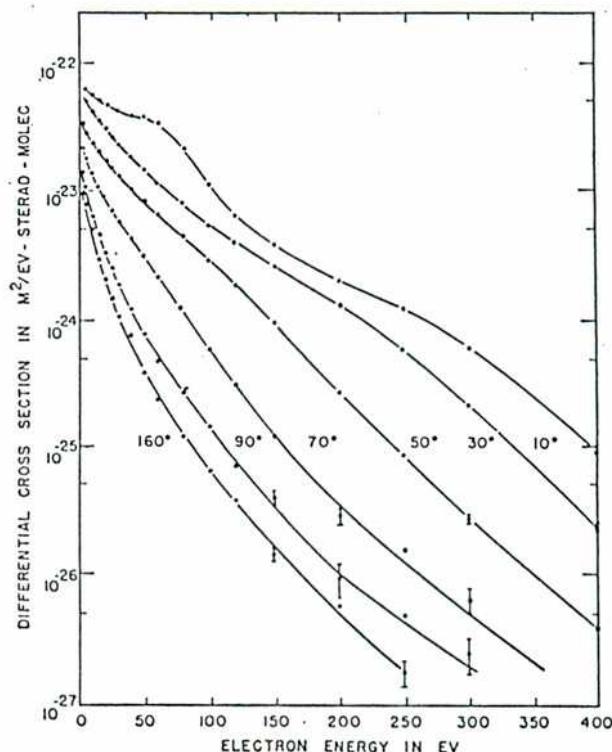


Figura 1.1: (Rudd y Jorgensen 1963) Sección eficaz doble-diferencial de la producción de electrones secundarios por protones de 150 keV en He

Sin embargo existían discrepancias significativas en aquellos electrones emitidos próximos a 0° y a 180° respecto de la dirección de incidencia. En particular en su espectro de 10° que es el menor ángulo que podían medir con su equipo, Rudd y Jorgensen (1963) observan un lomo en la emisión electrónica (figura 1.1) y acotan: *“The ‘humps’ on the 10° curves were thought to be due to spurious electrons but reruns with additional shields failed to eliminated them.”*³

Dicho lomo llama la atención de Oldham (1967), quien señala que esta estructura se ubica justamente en la zona en que la velocidad del electrón emitido es cercana a la del proyectil (en módulo y dirección). Sugiere que esto puede deberse a la interacción entre el electrón dispersado y el proyectil. Tal interacción no había sido tenida en cuenta en los cálculos anteriores.

Sin embargo ninguno de los equipos era capaz de medir la emisión de electrones

³ *“Se piensa que los ‘lomos’ en las curvas de 10° son debidos a electrones espúreos, pero pruebas con un blindaje adicional fracasaron en eliminarlos”*

a 0° . La dificultad consiste en que esa es justamente la dirección del haz. Es necesario practicar un orificio o ranura en el espectrómetro para que el haz pase de largo, mientras que los electrones producidos en la colisión sean desviados para su detección. Además el haz debe estar finamente colimado, ya que si incide sobre alguna pieza del espectrómetro la emisión de electrones secundarios enturbia la medición.

Salin (1969a, 1969b) propone una teoría para la ionización, inspirada en la necesidad de verificar las correctas condiciones de contorno asintóticas de la función de onda en el estado final del electrón sometido a dos potenciales coulombianos. En el cálculo se observa claramente el lomo a 10° en acuerdo con las mediciones previas. Salin señala que sus expresiones contienen un brusco incremento en la sección eficaz para $v' \rightarrow 0$ pero no presenta resultados numéricos para ángulos menores que 10° . El resultado que obtiene es particularmente sencillo:

$$\frac{d\sigma}{dv} = \left| N_{(Z_{eff}/v')} \right|^2 \left(\frac{d\sigma}{dv} \right)_{B1} \quad (1.1)$$

donde $(d\sigma/dv)_{B1}$ es la SEDD en primera aproximación de Born (véase sección 1.3.1), $N(\alpha)$ es el factor de coulomb:

$$\left| N(\alpha) \right|^2 = \frac{2\pi\alpha}{1 - e^{-2\pi\alpha}} \quad (1.2)$$

y Z_{eff} es una carga efectiva definida por:

$$Z_{eff} = Z_P \left[1 - Z_T \left(\frac{v'}{v_i} \right) \right] \quad (1.3)$$

1.1.2 El Descubrimiento

En 1970, Macek (1970) elabora una teoría que predice un pico a 0° en la distribución electrónica. Está construida en base a una sugerencia de Rudd, quien propone un nuevo mecanismo para la ionización: algunos electrones son 'arrastrados' por el proyectil por un tiempo y luego se separan para ser detectados como electrones libres con velocidades próximas al mismo.

La teoría de Macek consiste en utilizar el primer término en la expansión de Neuman de la ecuación de Faddeev (1960). La matriz de transición que obtiene es de la forma:

$$t_{fi} = t_{B1} + t_{BK} - t_{PW} \quad (1.4)$$

donde t_{B1} , t_{BK} y t_{PW} son las amplitudes de primer orden de Born, tomando como estado final del electrón una función de onda del continuo del blanco (aproximación de Born), del continuo del proyectil (aproximación de Brinkman y Kramers) y de onda plana respectivamente (para expresiones completas véase sección 1.3.1). Sólo el término centrado en el proyectil resulta responsable del pico que, cuando $v' \rightarrow 0$, es divergente como $1/v'$. Esta descripción como suma de amplitudes sugiere la existencia de un nuevo mecanismo que fue bautizado : *Charge Transfer to the Continuum States* ⁴ (CTC) ⁵. Siguiendo el mismo enfoque, Band (1974) utiliza una combinación lineal de orbitales atómicos en el estado final, obteniendo mejores resultados cuantitativos. En este tipo de teorías, los potenciales del proyectil y del blanco residual están considerados como responsables alternativos de la ionización.

En el mismo año, Crooks y Rudd (1970) publican la primera medición de la emisión electrónica a 0° en la colisión $H^+ \rightarrow He$ entre 100 keV y 300 keV. Verifican que la velocidad en la que se observa el pico coincide con la del proyectil y comparan con la teoría de Macek, obteniendo un buen acuerdo cualitativo (figura 1.2).

Casi simultáneamente Harrison y Lucas (1970) observan el mismo pico en colisiones con láminas de Carbono. La historia del pico de CTC había comenzado.

En 1972, Salin presenta un cálculo con el mismo desarrollo del año 1969 en el que tiene en cuenta además la correlación electrónica para la colisión $H^+ \rightarrow He$. El acuerdo con los datos experimentales es excelente aunque no compara con mediciones a ángulos menores de 10° . En dicho artículo señala la dificultad esencial que presenta este tipo de cálculo: que debe considerarse el movimiento de tres partículas interactuando mediante potenciales coulombianos. Al ser coulombianos, ninguno de ellos puede ser totalmente despreciado y aproximaciones como la de Born no convergen. El autor destaca la importancia que tiene describir correctamente las condiciones asintóticas de contorno para la función de onda del estado final. Con este enfoque los potenciales del proyectil y del blanco residual están considerados simultáneamente en el estado final.

Un tercer desarrollo fue el realizado por Dettmann (Dettmann *et al* 1974) que consistió en calcular el segundo orden de Born. La expresión obtenida para la SEDD es:

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{v}} = |N_{(Z_P/v')}|^2 F(v_i) \quad (1.5)$$

⁴Transferencia de Carga a Estados del Continuo

⁵En esta tesis utilizaremos la denominación ETC por considerarla más apropiada

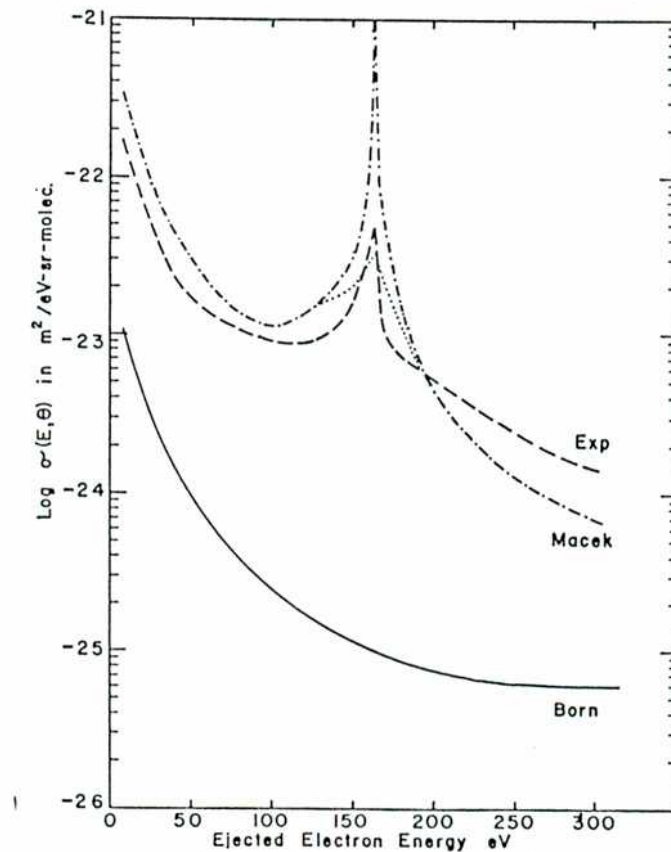


Figura 1.2: (Crooks y Rudd 1970) Secciones eficaces para electrones emitidos en la colisión $H^+ \rightarrow He$ a 0° . Medición y resultados teóricos. (---): Teoría de Macek a 0° ; (···): a 1.4° .

con $N(\alpha)$ el factor de coulomb que da origen al pico (ecuación 1.2) y F una función de la velocidad del proyectil, que en el límite de altas velocidades es de la forma:

$$F(v_i) = \frac{2^{15}}{5\pi} Z_P^2 Z_T^5 \left(\frac{1}{v_i}\right)^{12} \left(0.3 + \frac{10\pi}{2^{12}} \frac{v_i}{Z_T}\right) \quad (1.6)$$

Dettmann es el primero en convolucionar los cálculos sobre el volumen de detección del equipo experimental, para remover la divergencia y comparar con las mediciones.

Como producto de la necesidad de considerar ambos potenciales simultáneamente, en 1971 se realiza el primer cálculo clásico con el método de Monte-Carlo sin despreciar ninguna interacción (Bonsen y Banks 1971). En ningún caso calculan para ángulos de emisión menores que 10° pero obtienen buen acuerdo general con los datos

experimentales.

Las distintas descripciones del pico tienen mucho en común. Todas pueden expresarse de la misma forma para $v' \ll Z_P$:

$$\frac{d\sigma}{dv} = \frac{1}{v'} \mathcal{F}(v_i, v) \quad (1.7)$$

donde $\mathcal{F}(v_i, v)$ es una función suave de v y es proporcional a $Z_P^3 Z_T^5$.

1.1.3 ¿Un mecanismo?

La forma final de la matriz de transición utilizada por Macek y Band, como suma de amplitudes de distintos 'mecanismos' de ionización, es un artilugio del cálculo y no una distinción natural. Esto ha conducido a una serie de confusiones. En primer lugar debería haber interferencias entre los distintos términos, que fueron buscadas experimentalmente sin resultado (Duncan *et al* 1977, Suter *et al* 1978). En segundo lugar, en muchos trabajos que presentan mediciones del pico de ETC, los autores restan un fondo a sus espectros debido a la 'ionización directa' para luego comparar con las 'teorías de ETC' (Cranage y Lucas 1976, Vane *et al* 1978, Rødbro y Andersen 1979).

En realidad la ionización es *un solo* canal de la colisión, independientemente de la región del espacio de velocidades del estado final electrónico que nos interese estudiar. Cuando mencionamos al pico de ETC, nos estamos refiriendo a la ionización con $v \approx v_p$ y no a un mecanismo aparte.

1.1.4 Mediciones

Hasta 1981 fueron realizadas diversas mediciones del pico de ECC en gases. En la tabla 1.I se encuentra una lista completa con las características de cada una. Se destacan entre ellas:

- Duncan y Menendez (1976) son los primeros en medir el pico en colisiones con gases apartándose ligeramente de 0° ($0^\circ \rightarrow 10^\circ$). En el dispositivo experimental, el haz iónico era interceptado a la entrada del espectrómetro, produciendo una gran cantidad de electrones secundarios. Son contadas las mediciones de este tipo en la literatura, y permiten observar nuevos detalles de la SEDD.

Autor	Sistema	Energía	θ	θ_0	Parámetro Medido
Crooks y Rudd 1970	$H^+ \rightarrow He$	100 \rightarrow 300 keV	0°	1.4°	$v_{pico} = v_i$ Compara forma con teorías
Duncan y Menendez 1976	$H^+ \rightarrow He$ $H_2^+ \rightarrow He, Ar$	350 \rightarrow 500 keV/amu	0° \rightarrow 10°	.44°	ΔE_{FWHM} vs θ_{lab} Y vs θ_{lab}
Cranage y Lucas 1976	$H^+ \rightarrow H_2,$ He, Ne, Ar	300 \rightarrow 1200 keV	0°	6°	Y vs v_i Compara forma con teorías
Menendez et al 1977	He^{++}, He^+ $\rightarrow Ar$	2 MeV	0° \rightarrow 10°	.25°	ΔE_{FWHM} vs θ_{lab} Y vs θ_{lab} Compara ELC con ECC
Duncan et al 1977	$He^{++} \rightarrow He$	500 keV/amu	1.6°	.3°	Buscan interferencias
Vane et al 1978	C^{9+}, O^{9+} $\rightarrow Ar$	1.6 \rightarrow 2.8 MeV/amu	0°	—	Y Dependencia en Z_p
Suter et al 1978	O^{9+}, Si^{9+} $\rightarrow Ne, Ar$	1.6 \rightarrow 3.9 MeV/amu	0°	—	Buscan interferencias
Chiu et al 1978	H^+, H_2^+ $\rightarrow He, Ar$	100 \rightarrow 400 keV/amu	0° \rightarrow 15°	1.0°	Comparan ancho angular (FWHM) con ancho en energía, a $\theta = 0$
Rødbro y Andersen 1979	$H^+ \rightarrow H_2,$ He, Ne, Ar	15 \rightarrow 1500 keV	0°	.36°	ΔE_{FWHM} vs v_p Y vs θ_{lab} Compara forma con teorías Continuidad con Captura
Breinig et al 1982	$H^+, O^{8+}, C^{6+},$ Si^{14+} $\rightarrow Ar, Ne$.7 \rightarrow 2 MeV/amu	0°	1.8°	Y vs Z_p y v_i Review

Tabla 1.1: Experimentos realizados hasta 1981. ΔE_{FWHM} representa al ancho a mitad de altura, Y al rendimiento del pico y θ_0 a la resolución angular del equipo (semiángulo de la aceptación angular).

- Chiu *et al* (1978), miden el ancho del pico en 0° y lo comparan con el ancho angular del mismo. Encuentran que en el espacio de velocidades, el pico deconvolucionado es tan ancho en la dirección de incidencia como lo es en la transversal.
- Vane *et al* (1978) miden la dependencia que tiene el rendimiento del pico de ECC con Z_p utilizando C^{6+} y O^{8+} . Ellos encuentran que la sección eficaz varía como $Z_p^{2.2 \pm 0.2}$. Esta medición fue extendida a otros proyectiles, obteniendo una dependencia similar (Breinig *et al* 1982). Este último trabajo es incluido en esta sección por estar realizado con criterios previos a 1981 en cuanto a la discusión que nos interesa.
- Rødbro y Andersen (1979) realizan una medición sistemática con protones sobre H_2, He, Ne y Ar , entre 15 y 1500 keV. Por la extensión temática y por el cuidado en la medición ocupa un lugar destacado en este período.

Los parámetros que se extraen del pico son: el ancho a mitad de altura y el rendimiento total. Desgraciadamente, en *todas* estas mediciones se resta un fondo a los espectros antes de extraer los parámetros de interés. En algunos casos es debido a la confusión mencionada en 1.1.3 y en los otros se realiza injustificadamente, acaso por considerarlo obvio o por tener un fondo artificial de electrones provenientes de colisiones del haz contra las piezas del analizador.

Evidentemente, el valor del ancho del pico a mitad de altura depende de si realizo el cálculo con o sin fondo (Chiu *et al* 1979). Por otra parte, el pico es divergente, de manera que su altura resulta un parámetro impreciso, fuertemente dependiente del volumen de resolución del sistema de detección (Meckbach *et al* 1977). Además el rendimiento está definido integrando los espectros a ángulo fijo entre límites arbitrariamente definidos. Desgraciadamente una dependencia de $1/v'$, no nos proporciona ningún parámetro de escala que sea útil para definir un 'ancho' o una 'extensión' del pico con un sentido físico claro.

Por estas objeciones, los resultados de las mediciones hasta 1980 son buenos indicadores del comportamiento de la sección eficaz cuando se comparan mediciones realizadas con un mismo equipo y con el mismo procesamiento del fondo, pero no resultan buenos parámetros cuantitativos para comparar entre mediciones con diferentes equipos o directamente con los cálculos.

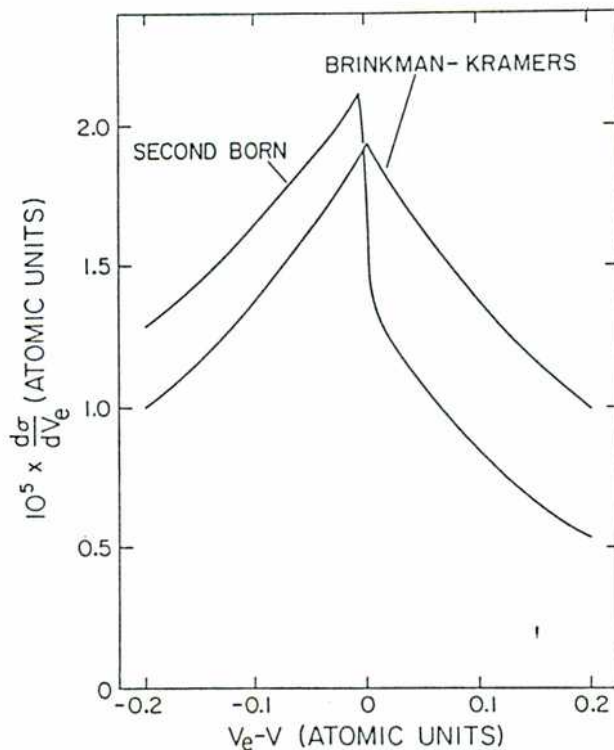


Figura 1.3: (Shakeshaft y Spruch 1978a) SEDD de ECC a $\theta = 0^\circ$ para $C^{6+} \rightarrow H(1s)$ a 2MeV/amu . El cálculo está convolucionado con $\theta_0 = 1.85^\circ$.

1.1.5 La asimetría

En los estudios de captura a estados ligados, se sabía que a muy altas velocidades, el segundo orden de Born domina sobre el primero, y que este segundo orden nunca representa una contribución despreciable (Drisko 1955, Shakeshaft y Spruch 1979a). Estimulados por esta idea, Shakeshaft y Spruch (1978a) realizan un cálculo hasta segundo orden de Born, obteniendo un pico de ETC fuertemente asimétrico (figura 1.3). El cálculo de Dettmann (1974) también estaba en segunda aproximación de Born, pero perdían la asimetría en una de sus aproximaciones.

La asimetría tiene su origen en la interacción del electrón en el estado final con el blanco que queda ionizado. La asimetría se manifiesta como un incremento de electrones emitidos con una velocidad menor que la del proyectil.

Este trabajo (Shakeshaft y Spruch 1978a) tiene un fuerte impacto ya que, midiendo la asimetría del pico de ETC se tendría una evidencia acerca de la importancia del segundo orden de Born para el proceso de captura, cuestión que no estaba verificada

hasta entonces (Shakeshaft y Spruch 1978b).

Resulta curioso que en varios trabajos en los que se observan picos claramente asimétricos, esto sea señalado sólo accidentalmente por los autores (Crooks y Rudd 1970, Cranage y Lucas 1976, Suter *et al* 1978, Vane *et al* 1978, Rødbro y Andersen 1979).

Sin embargo, un cálculo detallado de primer orden de Born también conduce a picos ligeramente asimétricos, debido a la suave dependencia de \mathcal{F} en \mathbf{v} (ecuación 1.7). De ser esto así, observar una asimetría no sería evidencia concluyente de la presencia de un segundo orden (Chan y Eichler 1979). Las respuestas a esta objeción son interesantes. En primer lugar la corrección del segundo orden de Born es mucho más importante que la realizada por Chan y Eichler (Shakeshaft y Spruch 1979b). En segundo lugar, las asimetrías son esencialmente diferentes.

En el segundo orden de Born, la función \mathcal{F} es discontinua en $\mathbf{v} = \mathbf{v}_i$. Es decir que el $\lim_{v' \rightarrow 0} \mathcal{F}$ toma distintos valores según el valor de θ' . A este tipo de asimetría se la denomina de tipo *divergente* por razones que se aclararán en la próxima sección.

Entonces, para conseguir una evidencia de la contribución del segundo orden de Born, es suficiente con fitear el pico de ECC para manifestar la presencia de una discontinuidad en \mathcal{F} (Breinig *et al* 1980, Macek *et al* 1981).

1.1.6 El desarrollo Paramétrico y el Método Estándar

Meckbach, Nemirovsky y Garibotti (1981), introducen una descripción general del pico de ETC, para incorporar los nuevos detalles observados en su forma. La idea es desarrollar la SEDD en una doble serie: en potencias de v' y en polinomios de Legendre para describir la parte angular. La expresión propuesta es consistente con la ecuación 1.7 y tiene la forma:

$$\frac{d\sigma}{dv} = \left(\frac{1}{v'}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} B_{nl} v'^n P_l(\cos \theta') \quad (1.8)$$

Con este desarrollo, indicando los parámetros B_{nl} que sólo dependen de v_i , quedaría caracterizada completamente la forma del pico. Los términos con $n = 0$ se los ha denominado *divergentes* debido a su dependencia en v' . El primer término divergente (B_{00}/v') representa al pico completamente simétrico y es la contribución más significativa. El parámetro B_{00} es el apropiado para definir el rendimiento del pico.

El segundo término divergente ($B_{01} \cos \theta'/v'$) da cuenta de la asimetría divergente, que es la predominante cuando $v' \rightarrow 0$. Definimos el parámetro de asimetría divergente como:

$$\beta = \frac{B_{01}}{B_{00}} \quad (1.9)$$

La importancia del trabajo de Meckbach *et al* (1981) reside en que allí no sólo se propone el desarrollo para la sección eficaz, sino que también se establece un método para evaluar los coeficientes B_{nl} a partir de los datos experimentales. Debido a su intensivo uso en la literatura, a este método lo denominaremos *el método estándar*. Cuando uno utiliza un aparato con una función transmisión $S(\mathbf{v}_1, \mathbf{v})$ ⁶, se convoluciona la sección eficaz, obteniendo como resultado de la medición:

$$Q(\mathbf{v}) = \int S(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}) \left(\frac{d\sigma}{d\mathbf{v}_1} \right) d^3\mathbf{v}_1 \quad (1.10)$$

Si defino las funciones:

$$U_{nl}(\mathbf{v}) = \int S(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}) v_1^{n-1} P_l(\cos \theta'_1) d^3\mathbf{v}_1 \quad (1.11)$$

y reemplazamos en la ecuación 1.8 obtenemos:

$$Q(\mathbf{v}) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} B_{nl} U_{nl}(\mathbf{v}) \quad (1.12)$$

Esta expresión nos permite vincular la medición Q con los parámetros B_{nl} . El último paso es fitear los datos experimentales con una combinación lineal de las funciones U_{nl} (inmediatamente computables conociendo la función transmisión del sistema), para extraer los B_{nl} .

La función transmisión del equipo se suele factorizar de la forma (Meckbach *et al* 1981):

$$S(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}) \approx V\left(\frac{v_1 - v}{v}\right) G(\theta_1 - \theta) \quad (1.13)$$

donde podemos denominar a V y G las funciones de transmisión en velocidad y ángulo respectivamente. Ambas valen 1 si su argumento es nulo y 0 en el infinito. A sus semianchos a mitad de altura se los llama resolución en velocidad (R) y en ángulo (θ_0) respectivamente. Si modelamos con funciones de tipo escalón a V y a G , resulta natural hablar de *volumen de resolución* como la región del espacio de velocidades que

⁶La función transmisión se define como la porción de electrones detectados con velocidad \mathbf{v}_1 cuando el detector está centrado en \mathbf{v}

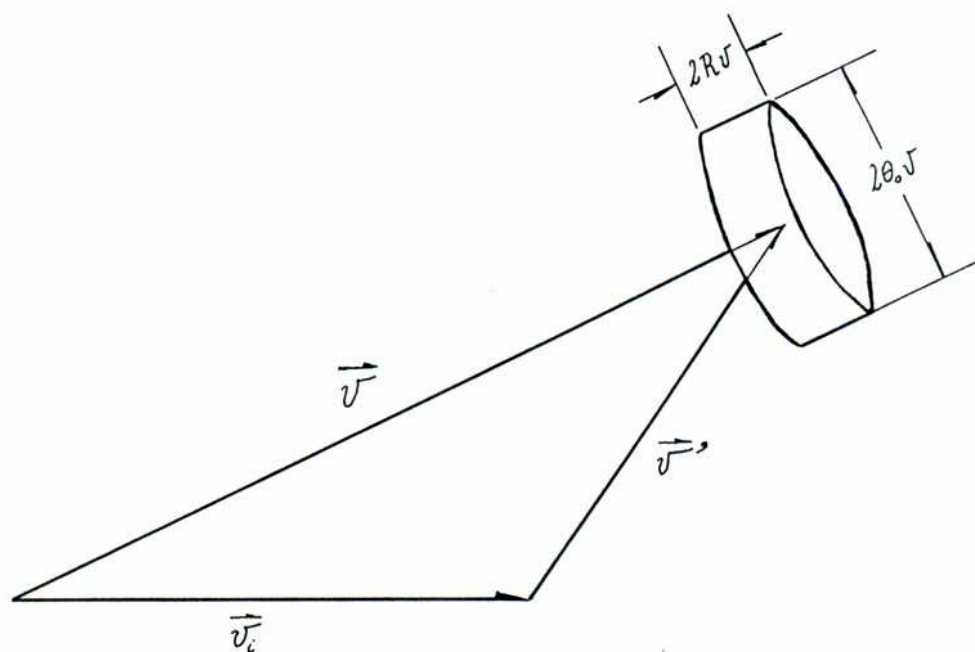


Figura 1.4: Volumen de resolución del detector.

observa el detector alrededor de \mathbf{v} (Meckbach *et al* 1977) (figura 1.4). El volumen de resolución mide:

$$\mathcal{V} = 2\pi R \theta_0^2 v^3 \quad (1.14)$$

de manera que si la sección eficaz varíe suavemente dentro de dicho volumen en el espacio de velocidades, la integral 1.10 podría aproximarse:

$$Q \approx \mathcal{V} \left(\frac{d\sigma}{d\mathbf{v}} \right) \quad (1.15)$$

aunque esta aproximación nunca pueda ser hecha en la cúspide del pico de ETC debido al carácter divergente de la SEDD. Valores típicos de R y θ_0 son .005 y 1° ($\approx .017 \text{ rad}$) respectivamente. Esto indica que el volumen de resolución tiene la forma de un disco, delgado en la dirección de $\hat{\mathbf{v}}$.

Este método de fiteo con la expresión 1.8, es el que invariablemente se ha venido usando hasta hoy para caracterizar la forma del pico de ETC. Sin embargo es importante señalar que aquí se abren un cúmulo de interrogantes acerca de su aplicación. Por ejemplo: ¿Cuántos y cuáles términos de la doble serie es necesario retener para describir el pico de ECC? ¿Qué influencia tienen pequeñas variaciones en la descripción de la función S ? Volveremos sobre estas cuestiones más adelante.

1.2 Las mediciones

Vamos a desarrollar en esta sección una discusión de las mediciones realizadas del pico de ECC, desde 1981 hasta la fecha. Las mediciones pueden dividirse en dos grupos según el tipo de equipo, el procesamiento de los datos y la información que se obtiene de la SEDD: por un lado aquellas en que miden sólo la emisión electrónica a 0° (la dirección de incidencia del proyectil) y por otro aquellas que exploran la forma de la SEDD en los alrededores de 0° .

1.2.1 Mediciones a 0°

En la tabla 1.II se encuentran todas las mediciones del pico de ECC en colisiones con gases atómicos, procesadas por el método estándar descrito en la sección 1.1.6 en colisiones con gases atómicos. En la tabla se indican los términos de diferente n y l incluidos en el fito con el desarrollo paramétrico, así como la función transmisión con que se ha modelado el equipo en cada caso. El fito realizado por Dahl (1985) es algo diferente y lo comentaremos en detalle más adelante.

Resulta conveniente utilizar los parámetros de Bohr (1948) para caracterizar diferentes regímenes de la colisión:

$$\eta = 2 \frac{v_i}{v_e} \tag{1.16}$$

$$\kappa = 2 \frac{Z_P}{v_i}$$

Como ya dijimos en la introducción, el valor de η indica si la velocidad de la colisión es baja, alta o intermedia respecto de la velocidad 'orbital' del electrón (v_e). El valor de κ indica si el potencial del proyectil puede ser tratado como una perturbación o debe realizarse una aproximación más descriptiva. En general, la condición de validez de la aproximación de Born es que η y κ sean mucho menores que uno. En la figura 1.5 se presentan los parámetros de Bohr para las mediciones de la tabla 1.II.

El rendimiento del pico

Todas las mediciones del rendimiento del pico se presentan en la figura 1.6. En ella podemos observar que tiene un máximo aproximadamente cuando la velocidad del

Capítulo 1: Estudios Realizados

Autor	Sistema	v_i [u.a.]	θ_0 [°]	R [%]	n	l
Meckbach et al 1981	$H^+ \rightarrow He$	1.2 → 3.1	1.7 → 2.5 Δ	.04 → .23 δ	0,1	0,1
Andersen et al 1984	$Au^{11+} \rightarrow He$	2.0	3.4 \square	.3 \square	0,1	0,1
Dahl 1985	$H^+ \rightarrow He$	1 → 3	.38	.5	$W_{0\pm}$ $W_{1\pm}$	
Berry et al 1985	$C^{6+} \rightarrow H$ $O^{8+} \rightarrow He$ $Ne^{10+} \rightarrow He$ $Ar^{18+} \rightarrow He$	6.3 8.7 → 17.2 17.6 15.0, 18.1	2 \square	2 Δ	0,1	0,1,2
Andersen et al 1986	$H^+ \rightarrow He$ $He^{2+} \rightarrow He$	6.3 → 10.2 4 → 8.9	3.4 \square	.3 \square	0,1	0,1,2
Knudsen et al 1986	$H^+ \rightarrow He$ $He^{2+} \rightarrow He$ $C^{6+} \rightarrow He$ $O^{8+} \rightarrow He$ $Cl^{11+} \rightarrow He$ $Au^{11+} \rightarrow He$	6.3 → 10.2 4 → 8.9 6.3 → 8.9 5.6 → 8.9 3.7 → 6.3 2 → 3.8	3.4 \square	.3 \square	0,1	0,1,2
Gulyás 1986	$He^{2+} \rightarrow He$	2.45 → 4	1.5 Δ	.25 \square	0,1	0,1
Gulyás 1990	$H^+ \rightarrow He$	2.8 → 3.5	.3 → 2 Δ	.25 \square	0,1	0,1,2

Tabla 1.II: Experimentos realizados desde 1981. θ_0 y R son la resolución angular y en velocidad del equipo. \square , Δ y δ representan funciones de transmisión cuadrada, trapezoidal y tipo delta. Para más referencia ver el texto.

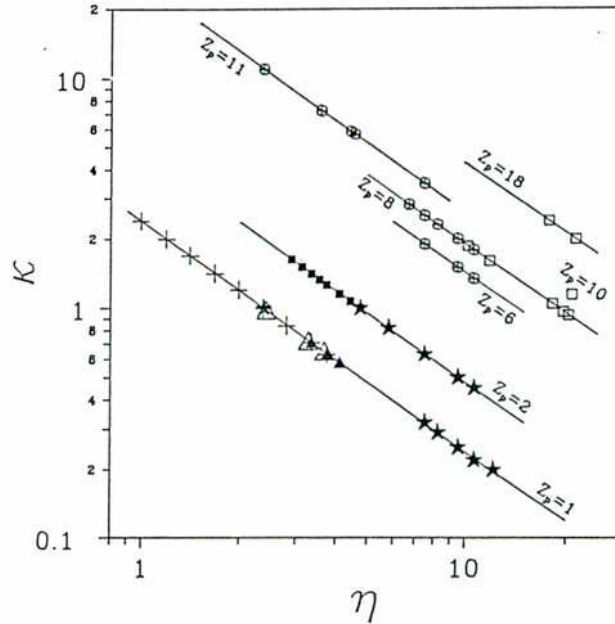


Figura 1.5: Parámetros de Bohr de las mediciones de la tabla 1.II en colisiones con blanco de *He*.

Meckbach *et al* (1981): (Δ) Dahl (1985): (+)
 Berry (1985): (\square) Andersen *et al* (1986): (\star)
 Knudsen *et al* (1986): (\oplus)

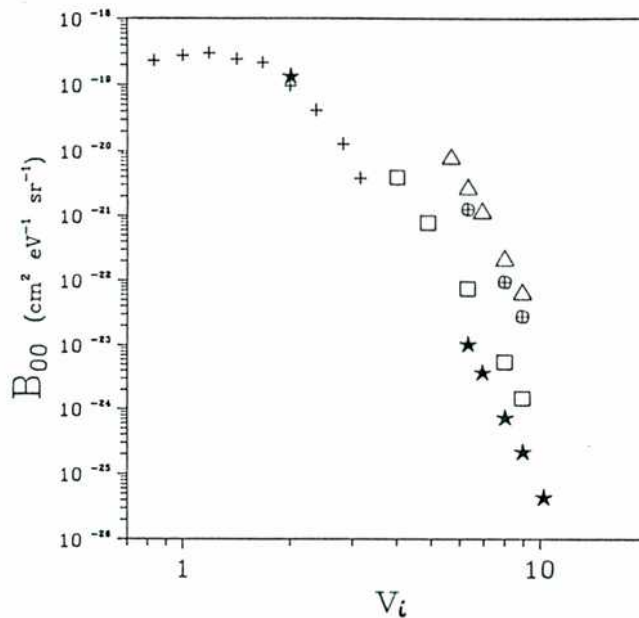


Figura 1.6: Mediciones del rendimiento del pico (B_{00}) en colisiones con blanco de *He*. El tamaño de los símbolos indica el error de cada medición.

Dahl (1985): (+) H^+ . Andersen *et al* (1986): (\star) H^+ ; (\square) He^{2+} .
 Knudsen *et al* (1986): (\oplus) C^{6+} ; (Δ) O^{8+} .

proyectil es comparable con una velocidad característica del electrón en el estado inicial. Este comportamiento es típico de las secciones eficaces de captura. A altas velocidades, la dependencia en la velocidad resulta ser aproximadamente v_i^{-11} independientemente de la carga del proyectil (ver tabla 1.III), como predice la segunda aproximación de Born (ecuación 1.5).

Sistema	x
$H^+ \rightarrow He$	-11.4 ± 0.9
$He^{2+} \rightarrow He$	-11.3 ± 1.1
$C^{6+} \rightarrow He$	-11.0 ± 1.1
$O^{8+} \rightarrow He$	-10.9 ± 1.2

Tabla 1.III: Dependencia de B_{00} obtenida de un ajuste realizado con la expresión $B_{00} \propto v_i^x$, entre 6 au y 10 au.

Esto indica que el límite asintótico de la dependencia en la velocidad es alcanzado para $\eta > 1$, independientemente del valor de κ .

Podemos investigar la dependencia en la carga del proyectil a partir de los cocientes $B_{00}(Z_P)/B_{00}(H^+)$. En la figura 1.7 mostramos la potencia con que B_{00} depende de Z_P . Allí podemos observar que en el caso de proyectiles livianos, la dependencia en Z_P alcanza su valor asintótico Z_P^3 a altas velocidades y que resulta ser más débil al disminuir la misma. El valor asintótico se alcanza cuando $\kappa \approx 1$. En todos los casos la potencia de Z_P está entre 2 y 3.

Para proyectiles de mayor carga (C^{6+}, O^{8+}) no se observa variación dentro de los errores experimentales y la potencia de Z_P se ubica alrededor de 2.7. En todo el rango de velocidades cubierto, $\kappa > 1$ y no se alcanza el límite asintótico Z_P^3 .

La asimetría divergente

El parámetro β (ecuación 1.9) caracteriza a la asimetría divergente. Como vimos anteriormente, resulta la característica más interesante de la forma del pico. Su valor indica la importancia relativa del campo coulombiano del blanco, que queda ionizado en el estado final, en la dinámica de la colisión. Como la asimetría es un incremento de la SEDD hacia las velocidades menores que la del proyectil, su valor es siempre negativo. En las figuras 1.8 y 1.9 presentamos los resultados de todas las mediciones

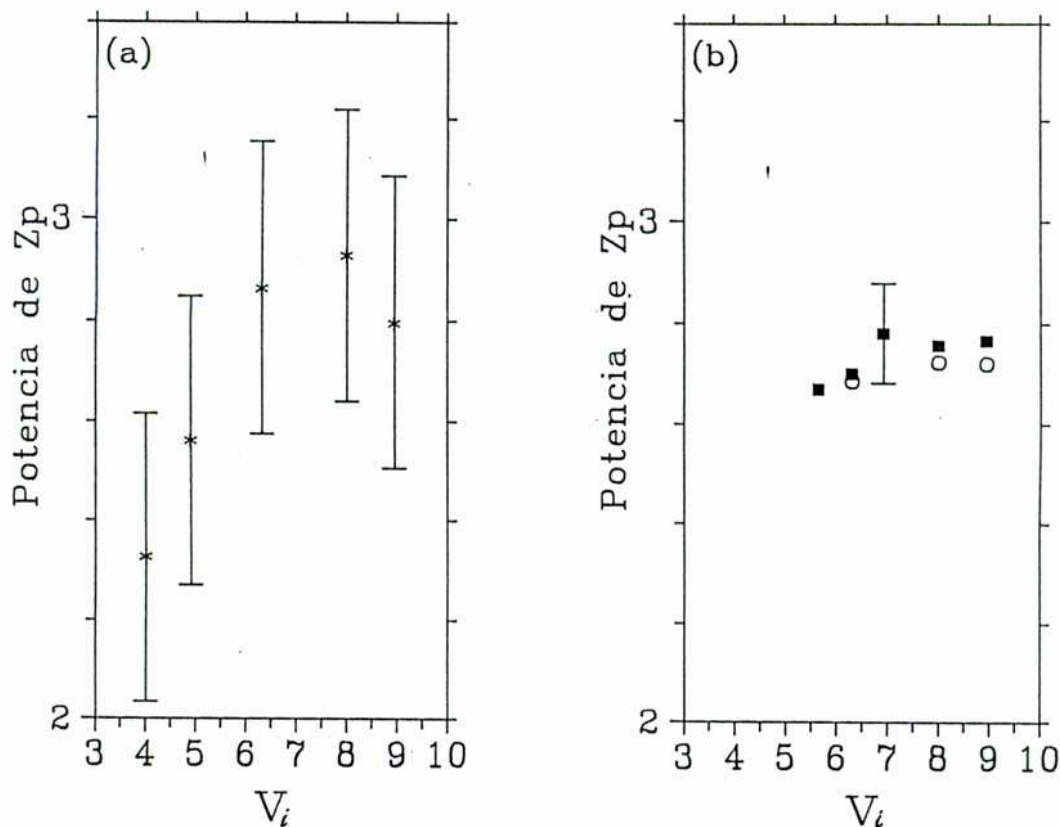


Figura 1.7: Dependencia de B_{00} vs Z_p . (a) He^{2+}/H^+ . (b) (o): C^{6+}/H^+ , (■): O^{8+}/H^+

realizadas. Graficamos por separado las colisiones con iones livianos (H^+ , He^{2+}) de aquellas con iones más pesados (mayor κ) sobre blanco de He.

La dispersión de los datos es muy grande. Difícilmente pueda afirmarse algo a partir de estas mediciones. Sobre los otros parámetros que describen la forma del pico, la dispersión de los datos es aún mayor y el número de mediciones disponibles es menor.

La caracterización del pico de ECC por el método estándar presenta serias dificultades que estudiaremos a continuación. El estudio de estos problemas y la necesidad de solucionarlos estimularon la realización de esta tesis.

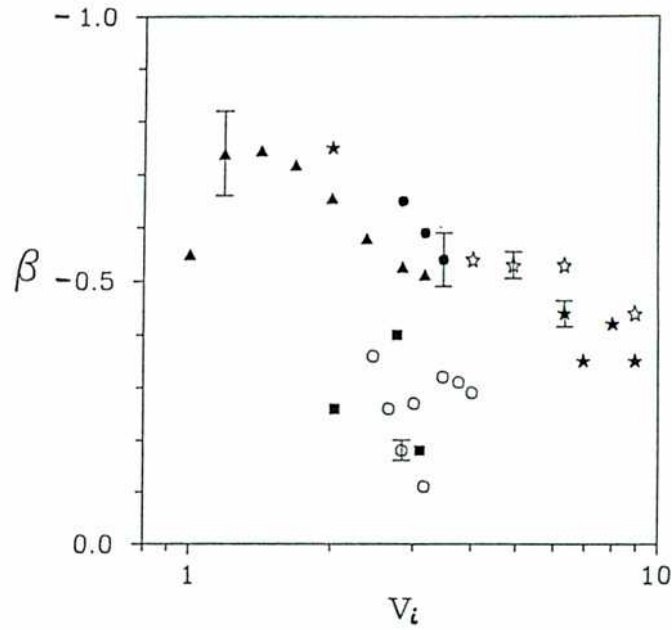


Figura 1.8: β vs v_i : Iones Livianos sobre He.
 H^+ : (■) Meckbach et al (1981), (▲) Dahl (1985), (★) Andersen et al (1986), (●) Gulyás et al (1990).
 He^{2+} : (☆) Andersen et al (1986), (○) Gulyás et al (1986).

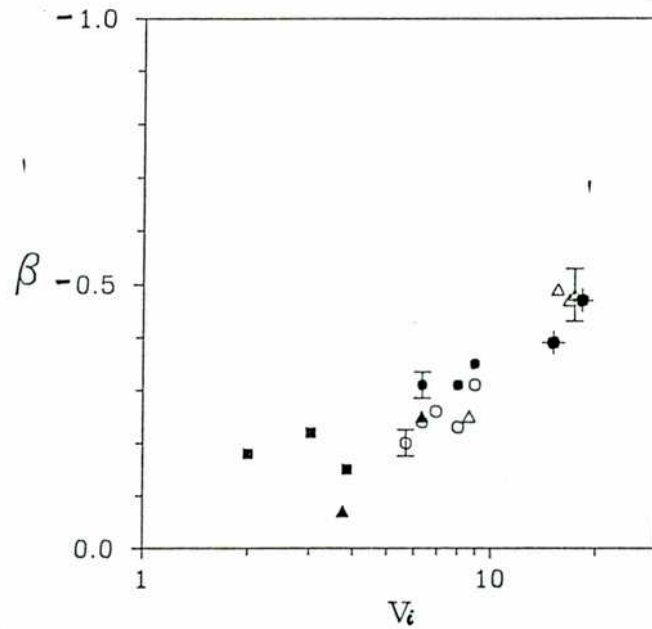


Figura 1.9: β vs v_i : Iones Pesados sobre He.
 Berry et al (1985): (Δ) O^{8+} , (\blacklozenge) Ar^{18+} .
 Knudsen et al (1986): (●) C^{6+} , (○) O^{8+} , (▲) Cl^{11+} , (■) Au^{11+} .

Los problemas del fiteo

Para aplicar el método estándar, debemos tomar un espectro medido y cortarlo en una región alrededor del pico. Además hay que truncar la doble serie infinita (ecuación 1.8) con algún criterio. Por último, para calcular las funciones U_{nl} debemos hacer una hipótesis acerca de la función transmisión del equipo y de la velocidad del proyectil. Todas estas elecciones son críticas para determinar los parámetros B_{nl} . Veamos estas cuestiones con más detalle:

Extensión del fiteo En principio, nada indica el rango de validez de la expresión (1.8). Se supone que vale *cerca* del pico, y que *cerca* significa $v' \ll v_i$. Gulyás *et al* (1986) estudiaron la dependencia de los coeficientes B_{nl} en función del rango del fiteo $(1 \pm q)v_i$ y encontraron que para $0.05 \leq q \leq 0.15$ los parámetros permanecen constantes. El problema no aparece al extender el rango del fiteo sino al acortarlo. El mismo grupo, al fitear sus mediciones alrededor de 0° (Gulyás *et al* 1989) decide desechar todos los puntos experimentales con $v' < 0.04 v_i$. Esto sugiere que muy cerca de v_i la descripción del pico no resulta tan sencilla: hace falta un conocimiento detallado de la transmisión del equipo.

Truncado de la Serie Se supone que la doble serie (ecuación 1.8) tiene una rápida convergencia, es decir que los parámetros B_{nl} toman valores menos significativos al aumentar n y l . Sin embargo, desde las teorías no hay ninguna indicación al respecto (salvo en la aproximación de Brinkman-Kramers que no es una buena aproximación para la forma del pico) y hay quienes sugieren que la serie puede tener una convergencia muy lenta (Oswald *et al* 1989, Jakubaš-Amudsen 1990) o que la misma sea incompleta (Elston *et al* 1985).

Lo que resulta claro es que si nos acercamos lo suficiente al pico como para que $v' \ll v_i$, los términos con $n = 0, 1$ serán los dominantes. Nadie ha intentado realizar un fiteo con $n > 1$. Con la dependencia en l no ocurre lo mismo. A $\theta = 0^\circ$, sólo podemos observar el comportamiento de U_{nl} en $\theta' = 0^\circ$ y 180° . Los polinomios de Legendre valen 1 hacia adelante y $(-1)^l$ hacia atrás. La única diferencia entre diferentes l de igual paridad está en la zona más próxima al pico ($v' < \theta_0 v_i$), donde la integral de convolución hace aparecer a $\theta = 0^\circ$ el comportamiento de los P_l fuera de esta dirección. Al utilizar términos con $l > 1$, estamos mejorando el ajuste en la cúspide del pico pero habrá una

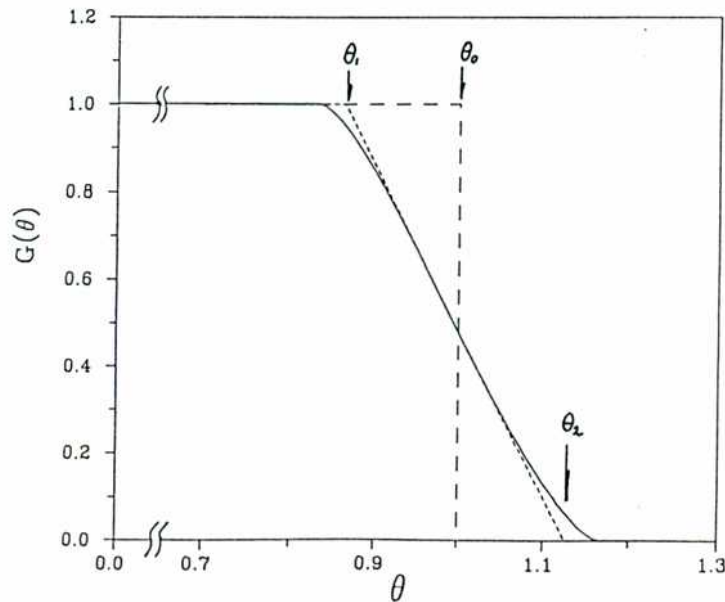


Figura 1.10: (Meckbach *et al* 1981) Transmisión angular del equipo para un diafragma de 1° .
 (—): Cálculo según geometría del equipo. (· · ·): Aproximación por trapecio.
 (- · -): Función escalón.

fuerte correlación entre los valores obtenidos de B_{nl} de igual n e igual paridad de l .

Transmisión del Equipo Como vimos, debido a la divergencia de $(d\sigma/dv)$, la función transmisión del analizador juega un rol fundamental en la forma del espectro medido. Como en general $R \ll \theta_0$, la resolución en energía no es muy importante para determinar la forma del pico como lo es la resolución angular.

Por consideraciones geométricas, la transmisión angular del equipo puede aproximarse bastante bien por una función trapecio o una función escalón (figura 1.10). Sin embargo, no existen mediciones independientes de $G(\theta)$, de manera que los valores de θ_1 , θ_2 ó θ_0 se estiman según los detalles de construcción del equipo. Estos valores tienen un error típico del 20%. Si variamos dentro de ese margen el valor de θ_0 , los parámetros divergentes pueden variar un 20% o más (Atan *et al* 1990).

Como solución a este problema, puede elegirse aquel θ_0 con el que se obtenga un mejor fiteo, un mínimo de χ^2 (Berry *et al* 1985, Atan *et al* 1990, Gulyás *et al* 1990). A partir del esquema de la figura 1.4 se entiende que el valor de θ_0 altera drásticamente la forma de las funciones U_{nl} en la zona más próxima a la cúspide del pico ($v' < \theta_0 v_i$).

Velocidad del Proyectoil Un detalle, pasado por alto por la mayoría de los autores, es la determinación de la velocidad del proyectil. Esta no suele medirse en forma independiente. El máximo del espectro no indica exactamente v_i porque, como el pico es asimétrico, la convolución lo desplaza hacia velocidades ligeramente menores que la del proyectil. La dependencia de los parámetros (particularmente los divergentes) con la velocidad del proyectil es enorme: una variación del 1 % en v_i produce un cambio del orden del 100 % en β (Atan *et al* 1990). También es importante la correcta alineación del equipo, ya que una pequeña desviación respecto de $\theta = 0^\circ$ altera drásticamente la forma de las U_{nl} (Kövéer *et al* 1986).

Una solución sería la de elegir aquella v_i con la que se obtenga el mejor ajuste. Esto resulta un problema: los valores de v_i y θ_0 así determinados están fuertemente correlacionados (Atan *et al* 1990). Para realizar un buen fiteo hace falta variar alternativamente θ_0 y v_i hasta que se establezca el valor de χ^2 . La dependencia de los parámetros con v_i y θ_0 está ilustrada en la figura 1.11.

Conclusión Pareciera ser que en la ‘punta’ del pico ($v' < \theta_0 v_i$) se halla concentrada la información acerca del truncado de la serie, la función transmisión del espectrómetro, y la velocidad del proyectil. Ninguna de estas características puede determinarse con la precisión necesaria por algún procedimiento independiente al mismo fiteo. Nuestra opinión es que esa zona del pico, al contener mezclada información de la colisión, del desarrollo paramétrico y del detector, no es útil para lograr una descripción del fenómeno físico subyacente. La objeción puede sintetizarse en el proverbio Zen: ‘No mires mi dedo, mira lo que estoy señalando con él’.

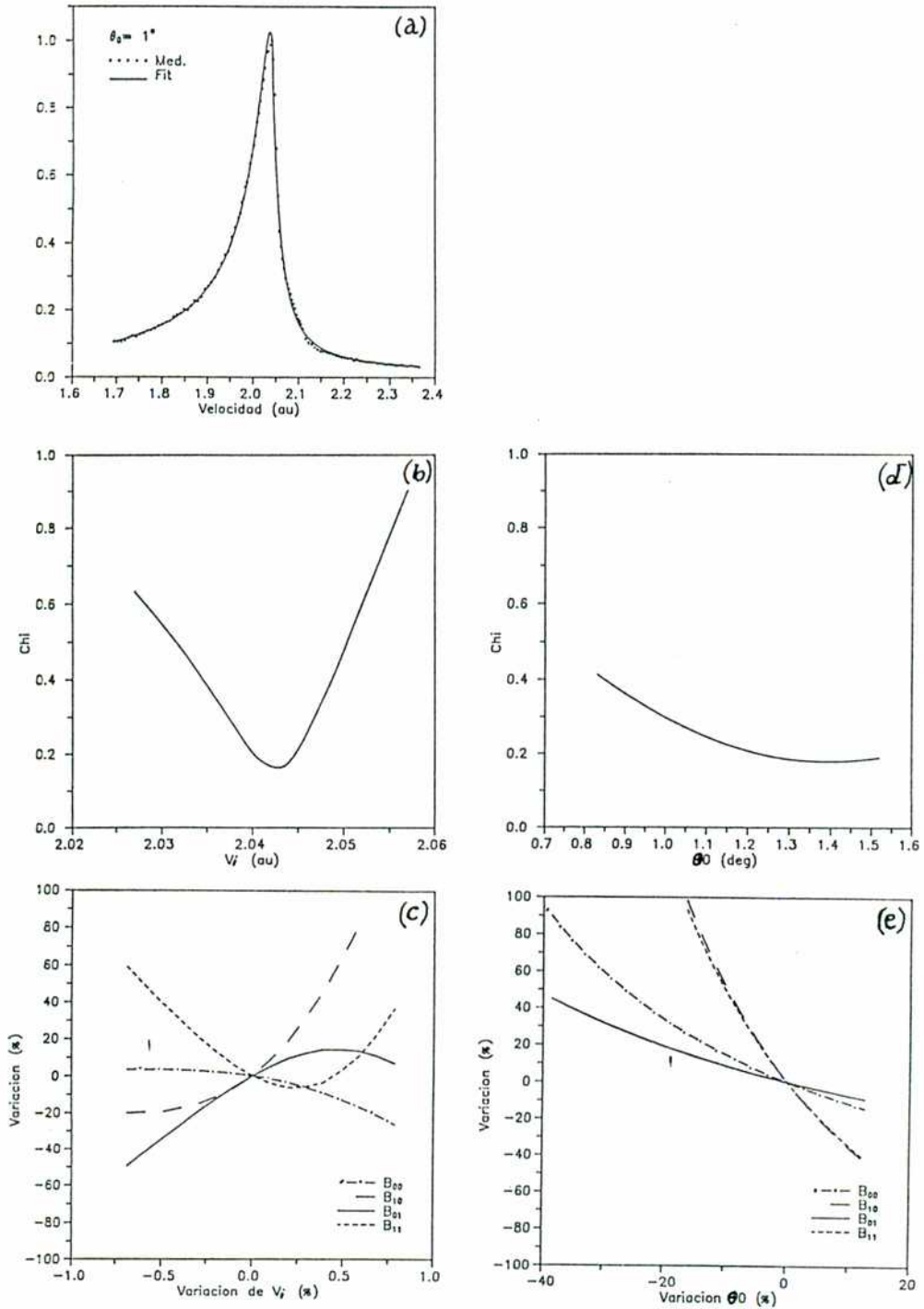


Figura 1.11: Dependencia de B_{nl} en v_i y θ_0 . Hemos fiteado un espectro típico de $H^+ \rightarrow He$ 100keV con cuatro parámetros ($n, l = 0, 1$) (a). (b) y (c) dependencia en v_i . (d) y (e) dependencia en θ_0 .

1.2.2 Mediciones alrededor de 0°

Existen muy pocas mediciones del pico de ECC alrededor de 0° . En la tabla 1.IV presentamos la lista de todas ellas. Este tipo de medición es muy útil porque permite explorar la dependencia angular del pico (en θ') permitiendo obtener mayor información sobre la contribución de los diferentes l , que la que se obtiene utilizando únicamente la dirección de incidencia.

Autor	Sistema	Energía	θ	θ_0	Observaciones
Vidal <i>et al</i> 1983	$H^+ \rightarrow He$	105 keV	$0^\circ \rightarrow 8^\circ$	0.5°	Problemas por Blanco extendido (Bernardi <i>et al</i> 1984)
Meckbach <i>et al</i> 1986	$H^+ \rightarrow He$	170 keV	$0^\circ \rightarrow 45^\circ$	1°	Problemas por Blanco extendido (Bernardi <i>et al</i> 1988)
Bernardi <i>et al</i> 1988	$H^+ \rightarrow He$	170 keV	$0^\circ \rightarrow 45^\circ$	1°	Poco detalle en el pico
Elston <i>et al</i> 1985	$O^{8+} \rightarrow Ne$	5.9 MeV/amu	$-2^\circ \rightarrow 2^\circ$	0.4°	
Dahl 1985	$H^+ \rightarrow He$	100-200 keV	$0^\circ \rightarrow 3.15^\circ$	0.5°	Problemas en la Normalización Angular
Gulyás <i>et al</i> 1989	$He^{2+} \rightarrow$ Ar, Kr	200 keV/amu	$0^\circ \rightarrow 4^\circ$	1.1°	Problemas en la Normalización Angular

Tabla 1.IV: Experimentos alrededor de 0° . Las mediciones están ordenadas según los grupos de trabajo. Sólo las realizadas en Bariloche (primer grupo) verificaron el problema de blanco extendido.

Las primeras líneas de nivel del pico de ECC fueron medidas por el grupo de Bariloche (Vidal *et al* 1983, ver las figuras en Groeneveld *et al* 1984). El método de medición consistía en medir espectros a diferentes ángulos y con esa información construir la superficie de $(d\sigma/dv)$ en el espacio de velocidades. Suponían que no era necesaria una normalización relativa de los espectros a diferentes ángulos, hipótesis que resulta no ser cierta debida al *efecto de blanco extendido*. El blanco está producido por la emisión de gas a través de una aguja hipodérmica ubicada en las proximidades del haz, en el foco del espectrómetro. Esto produce un blanco bien localizado *pero no puntual*. La emisión electrónica se produce a lo largo de todo el cilindro de intersección entre el haz y el gas que actúa como blanco. El analizador no observa esta emisión *desenfocada* si el ángulo de medición se aparta lo suficiente de la dirección de incidencia. Pero sí lo hace al aproximarse a la misma. Este efecto provoca que el 'blanco efectivo' se incre-

mente al medir hacia adelante. Bernardi *et al* (1984) demostraron que la medición de Vidal *et al* (1983) estaba afectada por el blanco extendido, pero no pudieron corregir cuantitativamente los datos, de manera que no discutiremos aquí los resultados de esta primera medición. Describiremos el efecto de blanco extendido con mayor detalle en el capítulo siguiente.

Meckbach *et al* (1986) realizaron mediciones con el mismo equipo y también observan el incremento de la emisión electrónica a 0° . Simultáneamente construyen un nuevo espectrómetro, con una velocidad de bombeo mucho mayor en la zona del blanco, minimizando así el efecto de blanco extendido. Con este nuevo equipo repiten las mediciones y se observa que el incremento a 0° era debido a este efecto instrumental. Sin embargo, no se proponían estudiar la forma del pico de ECC, de manera que los puntos medidos en las proximidades del pico resultan insuficientes para nuestro propósito. Con este último equipo hemos realizado las mediciones que se presentan en esta tesis.

El equipo diseñado por Elston (1987) resulta bastante interesante porque permite observar varios ángulos alrededor de 0° *simultáneamente*, gracias a un detector de electrones sensible a posición. Presentamos un diagrama del dispositivo en la figura 1.12. Con este equipo se ha dedicado a estudiar el pico de ELC. La única medición de ECC se hizo sólo para mostrar las diferencias cualitativas entre los picos de captura y pérdida. No extrae mayor información que las líneas de nivel (Elston *et al* 1985). El blanco, dado por una celda con gas, debe ser apreciablemente extendido. El resultado se muestra en la figura 1.12.

La medición presentada por Dahl (1985) también está realizada tomando espectros a diferentes ángulos, pero tiene problemas con la normalización relativa, que el mismo autor señala: "*The experimental difficulties were not fully overcome and the irregular spacing of the data curves is not believed to be correct.*" ⁷ (Dahl 1985).

Tenemos por último las mediciones realizadas por Gulyás *et al* (1989). Otra vez la estructura doble-diferencial está construida a partir de espectros a diferentes ángulos. Para evitar problemas experimentales, la normalización relativa de las mediciones está realizada de manera tal que la línea Auger $L_2M_{23}^2(^1S_0)$ del Argón, que se sabe que es isotrópica en colisiones con electrones (Cleff y Melhorn 1974), tenga el mismo rendimiento a todo ángulo en sus espectros de $He^{2+} \rightarrow Ar$. Sin embargo, en coli-

⁷ "*Las dificultades experimentales no están completamente resueltas y no se cree que sea correcto el espaciado irregular de las curvas de datos.*"

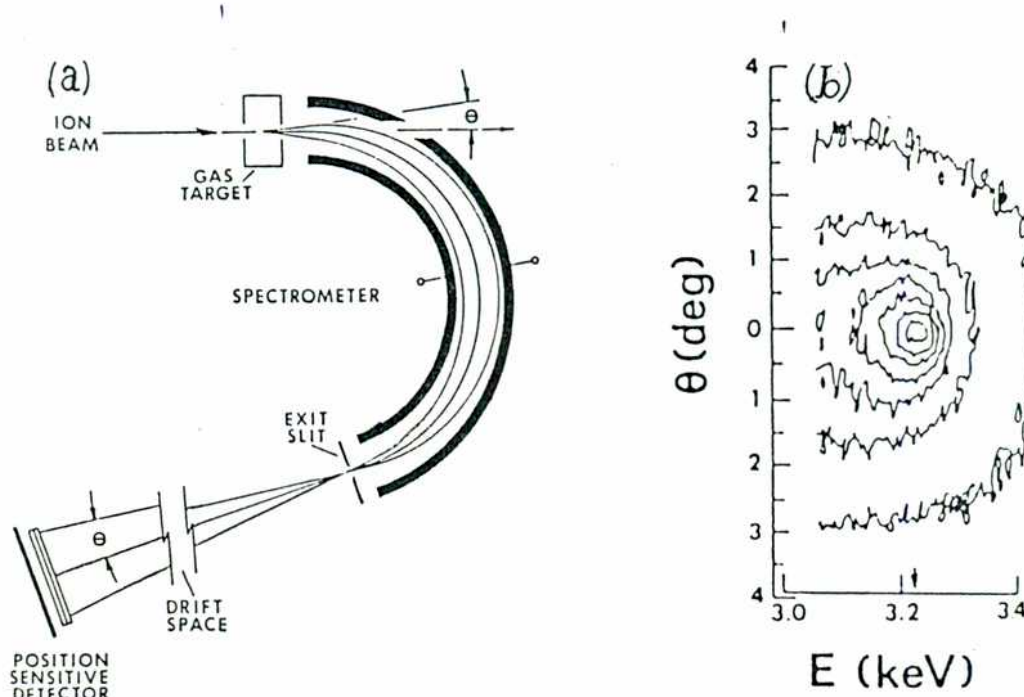


Figura 1.12: (Elston 1987) (a) Diagrama del espectrómetro, equipado con un detector sensible a posición para resolver los diferentes ángulos de emisión. (b) Líneas de nivel de las mediciones de $O^{8+} \rightarrow Ne$ a $15.4 au$. Las líneas representan múltiplos de 12.5 % de la altura del pico.

siones con iones a velocidades comparables a la de los mismos electrones Auger, la interacción post-colisional entre el electrón y el proyectil, altera la forma de la línea Auger así como su distribución angular. En particular produce un incremento significativo de la emisión electrónica hacia adelante cuando la velocidad del ion es inferior a la del electrón (Barrachina y Macek 1989, Swenson *et al* 1989). Utilizando una aproximación de onda distorsionada (Barrachina y Macek 1989), hemos calculado el enfoque de la línea Auger $L_2M_{23}^2(^1S_0)$ del Argón para la colisión $He^{2+} \rightarrow Ar$ a $200keV/amu$ (Pregliasco y Barrachina 1993). El incremento de la emisión Auger a 0° es de un factor 9 respecto de 2° . Una vez convolucionado con la resolución angular de su espectrómetro, el factor de acrecentamiento sigue siendo considerable: 3 (figura 1.13). Esto provoca que hayan sido subestimadas las mediciones a ángulos pequeños y seguramente la estructura 'replegada' que se observa en sus líneas de nivel, se deban exclusivamente a esta mala normalización angular (figura 1.13).

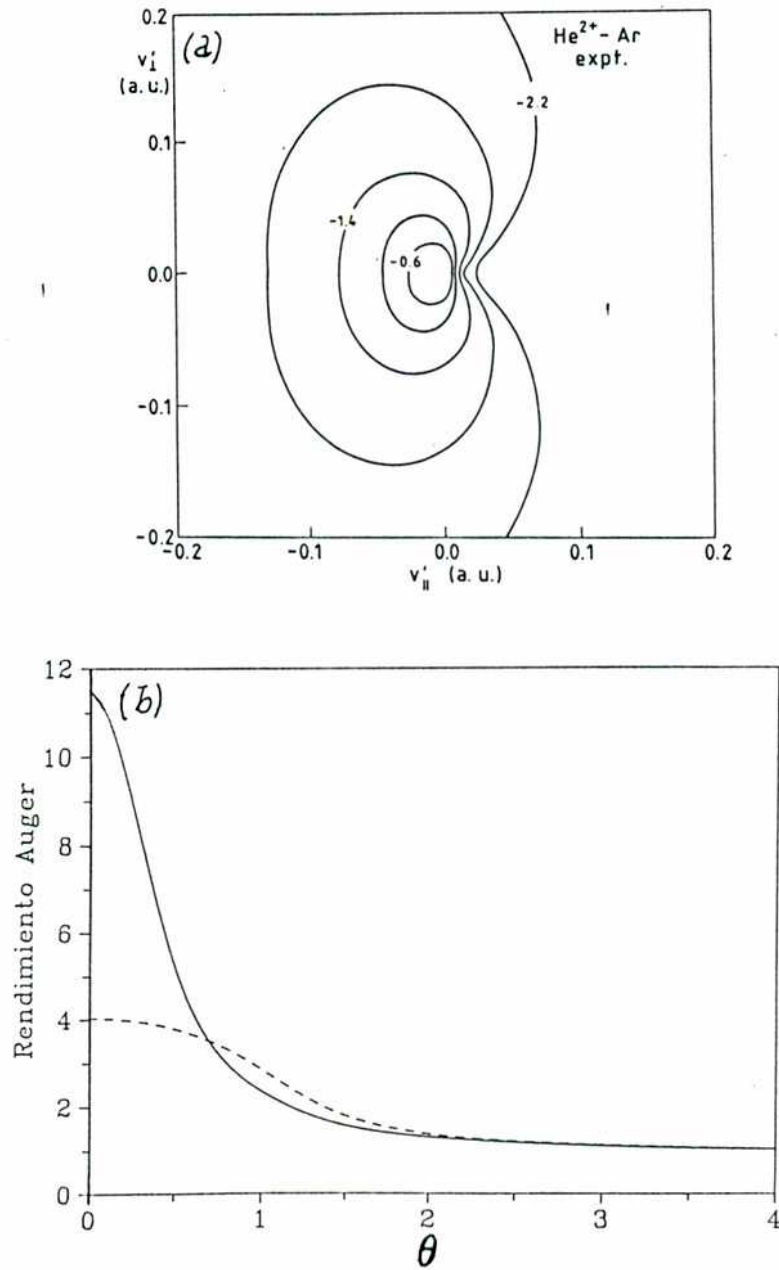


Figura 1.13: (a) Líneas de nivel de la SEDD, resultado de un fiteo de las mediciones $He^{2+} \rightarrow Ar$ a 200keV/amu (Gulyás *et al* 1989). Los niveles están equiespaciados en el logaritmo de la altura. v_{\parallel} y v_{\perp} indican las componentes de la velocidad paralela y perpendicular a la del proyectil, respectivamente. (b) Rendimiento de la línea Auger $L_2M_{23}^2(1S_0)$ del Ar en la misma colisión. (—) Cálculo con aproximación de onda distorsionada (Barrachina 1992). (---) Cálculo convolucionado con la resolución del detector ($\theta_0 = 1.1^\circ$).

Como podemos observar, para realizar mediciones alrededor de 0° , existen serias dificultades experimentales. En la literatura, el pico medido por Elston (1987) resulta el único antecedente útil de los resultados de esta tesis a pesar de que, como señalamos, es posible que esté deformado por el efecto de blanco extendido.

1.3 Los desarrollos teóricos

En esta sección haremos un comentario de los diferentes desarrollos teóricos que han sido planteados para describir el pico de ECC. Comenzamos con el planteo cuántico del problema, sin pretender ser exhaustivos. Para más detalles ver el libro de Taylor (1972). Al final de esta sección (figuras 1.17 y 1.18) mostramos los resultados disponibles de B_{00} y de β vs. v_i para las distintas aproximaciones.

Debido a que M_P y M_T son mucho mayores que 1, la interacción internuclear (V_{PT}) no puede provocar transiciones electrónicas y no tiene ningún efecto en el valor de las secciones eficaces doble-diferenciales (Brinkman y Kramers 1930, éste es el llamado ‘argumento de Wick’, ver nota a pie de página en Jackson y Schiff 1953). Si designamos por T a la energía cinética, el hamiltoniano total del sistema es:

$$H = T + V_P + V_T = H_i + V_i \quad (1.17)$$

$$= H_f + V_f \quad (1.18)$$

donde $H_{i,f}$ son los hamiltonianos sin perturbar del canal inicial y final respectivamente. Llamaremos Ψ y $\varphi_{i,f}$ a las autofunciones de H y $H_{i,f}$ respectivamente, todas con autovalor E . La matriz de transición en la forma prior es:

$$t_{fi} = \langle \Psi_f^- | V_i | \varphi_i \rangle \quad (1.19)$$

El estado final es el estado de colisión que resuelve exactamente el movimiento del electrón en ambos potenciales coulombianos. Verifica la ecuación de Lippmann-Schwinger:

$$|\Psi_f^- \rangle = [1 + G^- V_f] |\varphi_f \rangle \quad (1.20)$$

donde G^- es el operador de Green total. Conviene definir además los operadores de Green de partícula libre (G_0) y los de proyectil y blanco ($G_{P,T}$):

$$\begin{aligned} G^- &= [E - i\epsilon - H]^{-1} \\ G_0^- &= [E - i\epsilon - T]^{-1} \\ G_{P,T}^- &= [E - i\epsilon - T - V_{P,T}]^{-1} \\ G_{i,f}^- &= [E - i\epsilon - H_{i,f}]^{-1} \end{aligned} \quad (1.21)$$

El problema consiste en aproximar de alguna manera razonable el estado final Ψ_f^- a partir de algún desarrollo de la ecuación de Lippmann-Schwinger.

1.3.1 Serie de Born

La serie de Born consiste en un desarrollo perturbativo para el estado de colisión. Para el estado inicial utilizaremos $V_i = V_P$ con lo que el estado sin perturbar se convierte en un producto de la función de onda libre del movimiento internuclear por la del electrón ligado inicialmente al blanco en un autoestado ϕ_T . La ecuación de Lippmann-Schwinger puede desarrollarse en potencias de V_f de la forma:

$$|\Psi_f^-\rangle = [1 + G_f^- V_f + G_f^- V_f G_f^- V_f + \dots] |\varphi_f\rangle \quad (1.22)$$

Esta serie infinita se denomina *Serie de Born*, y si retengo los primeros n términos tendremos la *Aproximación de Born de orden n* .

Primer orden de Born

El primer orden de Born consiste entonces en calcular:

$$t_{fi} = \langle \varphi_f^- | V_i | \mathbf{K}_{T_i}, \phi_T \rangle \quad (1.23)$$

Según la elección de H_f y V_f tendremos diferentes aproximaciones. Presentaremos los resultados de las más importantes:

- $H_f = T$ *Aproximación de onda plana*

Aquí el electrón está libre en el estado final y la interacción con el proyectil y con el blanco son considerados una perturbación. La aproximación da cuenta de la esfera binaria, pero no contiene ninguno de los picos divergentes debido a los potenciales del proyectil o del blanco. El resultado es:

$$|t_{PW}|^2 = \frac{2^4 Z_P^2 Z_T^5}{\pi^3 Q^4} \frac{1}{(|\mathbf{v} - \mathbf{Q}|^2 + Z_T^2)^4} \quad (1.24)$$

- $H_f = T + V_T$ *Aproximación de Born*

El electrón en el estado final se modela con una función del continuo del blanco. El potencial del proyectil es la perturbación. La aproximación da cuenta de la esfera binaria y del pico de electrones lentos, pero no contiene el pico de ECC. El resultado es:

$$|t_{B1}|^2 = |2 N(Z_T/v) t_{PW}|^2 \left[\frac{(Q^2 - \mathbf{Q} \cdot \mathbf{v})^2 + (Z_T \mathbf{Q} \cdot \hat{\mathbf{v}})^2}{Q^2 + Z_T^2 - v^2 + (2Z_T v)^2} \right] \cdot \exp \left[-2Z_T/v \arctan \left(\frac{2Z_T v}{Q^2 + Z_T^2 - v^2} \right) \right] \quad (1.25)$$

donde N es el factor de Coulomb:

$$N(\alpha) = \exp\left(\frac{\pi\alpha}{2}\right) \Gamma(1 - i\alpha) \quad (1.26)$$

- $H_f = T + V_P$ *Aproximación Brinkman-Kramers*

Aquí modelamos al electrón en el estado final con una función del continuo del proyectil. Llamamos ϕ_{P, \mathbf{k}_P}^- a la función electrónica del continuo del proyectil:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \phi_{P, \mathbf{k}_P}^- \rangle &= \omega_P^-(\mathbf{r}_P, \mathbf{k}_P) \langle \mathbf{r} | \mathbf{v} \rangle \\ \omega_P^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}) &= N(\alpha_P) {}_1F_1 [i\alpha_P, 1, i(kr - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})] \\ \omega^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}) &= \omega^{*-}(\mathbf{r}, -\mathbf{v}) \\ \alpha_P &= Z_P/v' \end{aligned} \quad (1.27)$$

La función $\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ es la *distorsión coulombiana* y ${}_1F_1$ la *función hipergeométrica confluyente* (Abramowitz y Stegun 1970).

El potencial del blanco es la perturbación. La aproximación contiene la esfera binaria y el pico de ECC, pero no el de electrones lentos. El resultado es muy sencillo:

$$|t_{BK}|^2 = |N(Z_P/v') t_{PW}|^2 \quad (1.28)$$

- *Aproximación de Dispersión Múltiple*

Para calcular la matriz de transición en su forma *prior*, la perturbación en el estado final no tiene necesariamente que tener una expresión simple. Basta con utilizar una función de onda φ_f^- lo más aproximada posible al resultado exacto Ψ_f^- . Garibotti y Miraglia (1980) proponen una función de onda que contenga las distorsiones coulombianas de las interacciones proyectil-electrón, blanco-electrón y proyectil-blanco:

$$\langle \mathbf{R}, \mathbf{r} | \varphi_f^- \rangle = \omega_P^-(\mathbf{r}_P, \mathbf{k}_P) \omega_T^-(\mathbf{r}_T, \mathbf{k}_T) \omega_{PT}^-(\mathbf{R}_P, \mathbf{K}_P) \langle \mathbf{R}, \mathbf{r} | \mathbf{K}_P, \mathbf{v} \rangle \quad (1.29)$$

Este formalismo es una modificación a la aproximación de Vainshtein, Presnyakov y Sobelman (1964) y se lo denominó aproximación de *Multiple Scattering*⁸ (MS). Presenta un comportamiento curioso: el resultado depende fuertemente de la

⁸ *Dispersión Múltiple.*

interacción internuclear. Barrachina y Garibotti (1983) muestran la forma del pico de ECC calculado con esta aproximación, con el potencial internuclear y sin él. Sin el potencial internuclear el resultado es sencillo y muy similar al de Salin (ecuación 1.1):

$$\frac{d\sigma}{dv} = |N(Z_P/v')|^2 \left(\frac{d\sigma}{dv} \right)_{B1} \quad (1.30)$$

que no presenta asimetrías divergentes. Estas aparecen al considerar la interacción internuclear, lo que no tiene una interpretación clara.

Segundo orden de Born

Una forma de incluir la influencia del blanco, consiste en calcular un orden superior de la aproximación BK. Tomamos entonces $H_f = T + V_P$. La aproximación de segundo orden de Born puede escribirse:

$$t_{B2} = t_{BK} + \langle \varphi_f^- | V_T G_P^+ V_P | \mathbf{K}_{T_i}, \phi_T \rangle \quad (1.31)$$

El segundo término es dominante sobre el primero a altas energías del proyectil, en la región del pico de ECC. Corresponde al mecanismo de dispersión doble sugerido por Thomas (1927b) para procesos de captura (Shakeshaft 1974). Para poder evaluar esta contribución es necesario simplificarla reemplazando G_P^+ por G_0^+ . Aún así el cálculo es muy trabajoso y deben realizarse aproximaciones de tipo pico⁹.

El primero en calcular el pico de ECC en segunda aproximación de Born fue Dettmann (1974) quien reemplaza por 1 la función hipergeométrica del estado final. Al hacer esta aproximación se pierde la asimetría divergente. Shakeshaft y Spruch (1978a) reemplazan la función hipergeométrica por una función de Bessel en el límite cuando $v' \rightarrow 0$. Utilizando esta aproximación obtienen un parámetro de asimetría divergente con el signo correcto.

La aproximación de Born resulta válida, siempre que los potenciales sean de corto rango, es decir que se atenúen más rápido que r^{-1} . Este no es el caso de los potenciales coulombianos que intervienen en la ionización. La influencia de dichos potenciales no puede despreciarse aún en el límite asintótico de grandes distancias entre el electrón y los iones proyectil y blanco. Un potencial coulombiano nunca puede ser considerado una perturbación. La convergencia de la serie de Born no está asegurada, y de hecho el segundo orden domina sobre el primero en la zona del pico de ECC a altas velocidades.

⁹ *Peaking approximations.*

1.3.2 Métodos de Onda Distorsionada

Para evitar los problemas de la serie de Born con el potencial coulombiano, se han buscado aproximaciones cuyo primer orden sea el dominante y que el desarrollo perturbativo sea de rápida convergencia. La idea del método de onda distorsionada consiste en elegir las perturbaciones de manera tal que las funciones de onda sin perturbar contengan las fases logarítmicas típicas de los potenciales coulombianos. Una aproximación que verifique ésto, se dice que satisface las *correctas condiciones asintóticas* de contorno (Cheshire 1964, Belkić *et al* 1979). Únicamente con esta elección (Corchis *et al* 1992), los potenciales perturbativos resultan ser de corto rango obteniendo así un desarrollo con las características buscadas.

Las nuevas funciones de onda serán de la forma:

$$\chi_{i,f}^{\pm} = \mathcal{L}_{i,f}^{\pm} \varphi_{i,f} \quad (1.32)$$

La distorsión debe verificar:

$$\begin{aligned} \lim_{r_P \rightarrow \infty} \mathcal{L}_i^+ &= \nu_P^+(\mathbf{r}_P, -\mathbf{v}_i) \\ \lim_{r_T \rightarrow \infty} \mathcal{L}_f^+ &= \nu_T^+(\mathbf{r}_T, \mathbf{v}) \end{aligned} \quad (1.33)$$

Donde ν es la fase eikonal:

$$\nu_x^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \lim_{r \rightarrow \infty} \omega_x^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \exp[\mp i \alpha_x \ln(kr \mp \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})] \quad (1.34)$$

Las funciones $\chi_{i,f}^{\pm}$ son autoestados de energía E del hamiltoniano $H_{i,f} + U_{i,f}$. Llamaremos $W_{i,f} = H - H_{i,f} - U_{i,f}$ a la perturbación residual. Introduciendo la distorsión en ambos canales (Belkić 1978), el primer orden en la forma prior se expresa:

$$t_{fi} = \langle \chi_f^- | W_i | \chi_i^+ \rangle \quad (1.35)$$

La perturbación W_i no tiene en general una expresión simple. Los cálculos se realizan en el formalismo de parámetro de impacto, donde no es necesario calcularla explícitamente. Obtenemos diferentes aproximaciones eligiendo diferentes distorsiones \mathcal{L}_i^+ y \mathcal{L}_f^- . Comentamos las más importantes (para un desarrollo más completo ver Fainstein, Ponce y Rivarola 1991).

Aproximación CDW

La aproximación de *Continuum Distorted Wave*¹⁰ (CDW) consiste en utilizar las distorsiones:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_i^+ &= \omega_P^+(\mathbf{r}_P, -\mathbf{v}_i) \\ \mathcal{L}_f^- &= \omega_T^-(\mathbf{r}_T, \mathbf{v})\end{aligned}\quad (1.36)$$

con esta distorsión, el estado final resulta:

$$\langle \mathbf{r} | \phi_f^- \rangle = \omega_P^-(\mathbf{r}_P, \mathbf{k}_P) \omega_T^-(\mathbf{r}_T, \mathbf{k}_T) \langle \mathbf{r} | \mathbf{v} \rangle \quad (1.37)$$

Puede observarse que los potenciales del proyectil y del blanco son tratados en forma simétrica. Esta aproximación sobrestima las secciones eficaces totales a energías intermedias, debido a que el estado inicial no está normalizado (Crothers 1982), lo que puede mejorarse con una apropiada renormalización (Crothers 1983).

Aproximación CDW-EIS

Para evitar este inconveniente, conviene simplificar la distorsión del estado inicial por una fase eikonal, lo que asegura una correcta normalización:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_i^+ &= \nu_P^+(\mathbf{r}_P, -\mathbf{v}_i) \\ \mathcal{L}_f^- &= \omega_T^-(\mathbf{r}_T, \mathbf{v})\end{aligned}\quad (1.38)$$

Esta aproximación se denomina *Continuum Distorted Wave-Eikonal Initial State*¹¹ (CDW-EIS). Fue introducida por Crothers y McCann (1983) y en vista de sus excelentes resultados Fainstein *et al* (1990) la extienden, calculando analíticamente la amplitud de transición para la ionización desde un estado inicial arbitrario. El cálculo resulta más sencillo que para la CDW ya que las funciones hipergeométricas aparecen sólo en el estado final.

Aproximación Impulsiva

Otra aproximación posible es utilizar una función de onda CDW para el estado final, y para el estado inicial una función de onda impulsiva de la forma (Chew 1950, McDowell

¹⁰ Onda distorsionada del continuo.

¹¹ Onda distorsionada del continuo-Estado inicial eikonal.

y Coleman 1970):

$$|\chi_i^+\rangle = \int \tilde{\phi}_T(\mathbf{q}) |\mathbf{K}_i + \mathbf{q}, \phi_{P, \mathbf{q}-\mathbf{v}_i}^+\rangle d\mathbf{q} \quad (1.39)$$

Esta función de onda puede interpretarse como la convolución de la distorsión proyectil-electrón sobre la distribución de momentos del estado electrónico inicial. Se calcula en su forma *post*. A este desarrollo lo llamaremos *Impulse Approximation*¹²(1A) (Miraglia y Macek 1991). El esfuerzo de cómputo es muy grande debido a que, a las integraciones numéricas habituales, se le agrega la integral en \mathbf{q} .

Aproximación DSPB

Presentaremos la versión distorsionada de la aproximación de potencial fuerte de Born (DSPB) que fue desarrollada por Taulbjerg, Barrachina y Macek (1990) para el proceso de captura electrónica. Recientemente se realizaron los primeros cálculos para ionización (Brauner y Macek 1992).

La aproximación está construida para describir sistemas muy asimétricos ($Z_P \gg Z_T$). Partimos de la forma *post* de la matriz de transición:

$$\begin{aligned} t_{fi} &= \langle \chi_f^- | W_f | \Psi_i^+ \rangle \\ &= \langle \chi_f^- | W_f (1 + G^+ W_i) | \Psi_i^+ \rangle \end{aligned} \quad (1.40)$$

Si el sistema es muy asimétrico podemos aproximar al operador de Green total G por el operador de Green del proyectil G_P . Esta aproximación corresponde a tomar el primer orden del desarrollo de G en potencias de Z_T/Z_P . Definimos la función de onda de DSPB como:

$$\begin{aligned} |\Psi_i^{+DSPB}\rangle &= (1 + G_P^+ W_i) |\chi_i^+\rangle \\ &= G_P^+ V_T |\chi_i^+\rangle \end{aligned} \quad (1.41)$$

donde la segunda identidad fue derivada por Faddeev (1960).

Como el potencial fuerte es el del proyectil, la función de onda final la aproximamos como una función del continuo del proyectil, despreciando la distorsión del blanco. Con estas consideraciones obtenemos la matriz de transición de DSPB como:

$$t_{DSPB} = \langle \mathbf{K}_P, \phi_{P, \mathbf{k}_P}^- | W_f | \Psi_i^{+DSPB} \rangle \quad (1.42)$$

¹² Aproximación Impulsiva.

Las características más importantes de esta aproximación son (i) que retiene la interacción con el potencial del proyectil a todos los órdenes, (ii) que la condición de validez es que $Z_T/Z_P \ll 1$ siendo útil para cálculos a energías intermedias, y (iii) la matriz de transición describe un proceso de dos pasos en el primer orden.

Como en la función de onda inicial aparece el operador de Green del proyectil y el potencial del blanco, $\Psi_i^{\dagger DSPB}$ queda desarrollada en término de funciones del continuo del proyectil que están fuera de la capa de energía, es decir que entre el impulso y la energía no se verifica la relación $E = k^2/2m$.

1.3.3 Trayectorias Clásicas

El cálculo de *Classical Trajectory Monte-Carlo*¹³(CTMC) (Abrines y Percival 1966, Olson y Salop 1977) involucra tres etapas:

- *Preparación del estado Inicial*

Se seleccionan mediante el método de Monte-Carlo, el parámetro de impacto de la colisión, y las coordenadas en el espacio de fases del electrón activo, a partir de una función de distribución elegida heurísticamente de manera tal que respete la correcta energía de ligadura cuántica del estado inicial. Es necesario que el proyectil se encuentre lo suficientemente lejos como para despreciar su influencia.

- *Evolución de la colisión*

Se integran numéricamente las ecuaciones de Hamilton del sistema.

- *Análisis del estado final*

Cuando las partículas se han alejado lo suficiente, puede caracterizarse la trayectoria como una excitación, ionización o captura, según los valores de la energía final del electrón respecto del proyectil y del blanco. Como los potenciales son Coulombianos, debe considerarse la evolución asintótica del sistema.

Con esta idea se calculan muchas trayectorias hasta tener suficiente estadística como para caracterizar la probabilidad de ionización de un electrón a una región del espacio de velocidades.

El pico de ECC fue encontrado con este tipo de cálculo por Reinhold y Olson (1989) para energías intermedias en colisiones de H^+ y He^{2+} sobre He . Obtienen una correcta

¹³*Monte-Carlo de Trayectorias Clásicas*

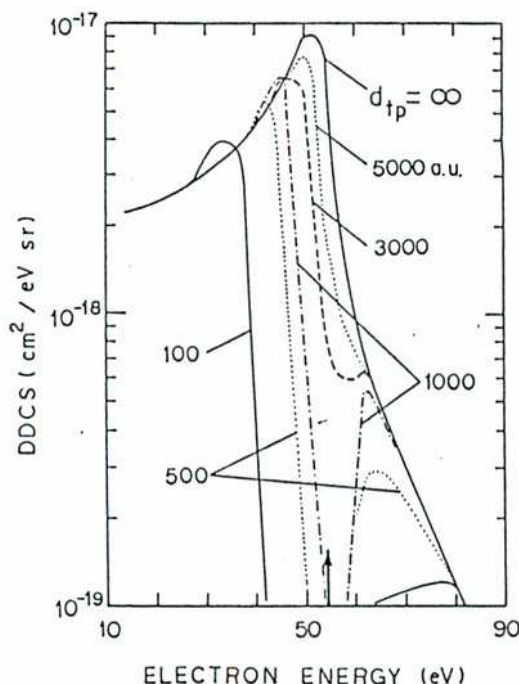


Figura 1.14: (Reinhold y Olson 1989) SEDD de la colisión $H^+ \rightarrow He$ a 100 keV. $\theta = 1^\circ$. Las diferentes curvas son los resultados de integrar las ecuaciones de movimiento hasta diferentes distancias internucleares d_{tp} . La flecha indica la velocidad del proyectil.

asimetría en las SEDD, pero encuentran que el pico se va formando muy lentamente: es necesario integrar las ecuaciones de movimiento más allá de 5000 ua de separación internuclear para conformar el pico de ECC (figura 1.14).

Un interesante trabajo en esta línea resulta el de Bandarage y Parson (1990). Describiremos con cierto detalle su resultado. Los autores calculan mediante el método de CTMC la colisión $H^+ \rightarrow H(1s)$ entre 4 y 25 keV. Definen la energía electrónica en el sistema molecular cuasiestático de los dos protones. De esta manera es posible determinar el momento en que un electrón alcanza la ionización: cuando su energía molecular pasa a ser positiva. A continuación, definen la ‘probabilidad de ionización’ como $P_u(t) = N_u(t)/N$, donde N es el número de trayectorias que conducen a la ionización, y $N_u(t)$ el número de trayectorias ionizadas hasta el tiempo t . Por definición $\lim_{t \rightarrow +\infty} P_u(t) = 1$. El resultado se muestra en la figura 1.15. En él los autores distinguen dos regímenes para la ionización: una ‘ionización violenta’ que ocurre cuando el proyectil y el blanco se encuentran cerca (los autores colocan el límite a $\pm 2 u.a.$ de distancia internuclear según la dirección z). En el segundo régimen, se va promoviendo

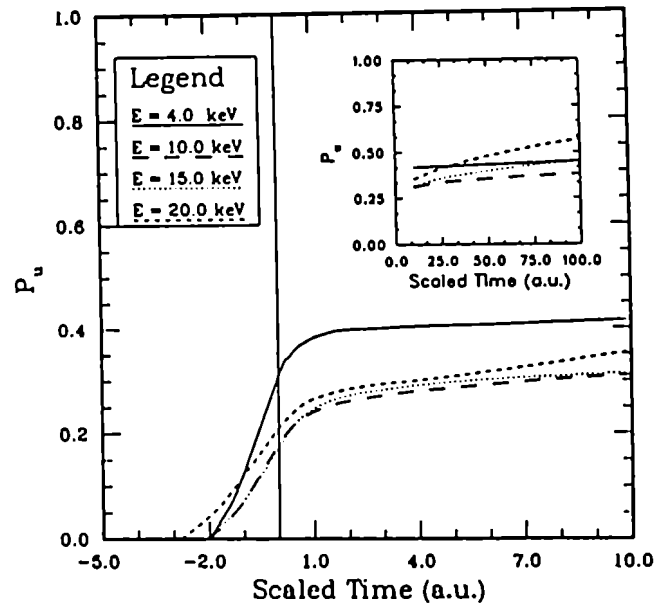


Figura 1.15: (Bandarage y Parson 1990) Dependencia temporal de $P_u(t)$ a diferentes energías de colisión. La abscisa indica como 'Scaled Time' a la distancia internuclear en la dirección z . Se inserta el gráfico del comportamiento a tiempos largos.

lentamente la energía electrónica, hasta alcanzar el continuo. Los autores denominan *Saddle Point Ionization*¹⁴ a esta forma de la ionización, denominación que oscurece la interpretación de su resultado. Preferimos traducirla como 'ionización lenta'.

Lo interesante del trabajo es que los distintos modos en que ocurre la ionización, contribuyen en distintas regiones del espacio de velocidades de la SEDD. Como se observa en la figura 1.16, aquellos electrones que provienen de una 'ionización violenta' son emitidos a velocidades mayores que la del proyectil en el sistema centro de masa, mientras que los electrones originados en una 'ionización lenta' tienen una velocidad menor. La división entre ambos regímenes es la curva $|\mathbf{v} - \mathbf{v}_i/2| = v_i/2$, que cruza por el centro del pico de ECC.

El resultado sugiere que hacia adelante del pico de ECC ($\theta' < 90^\circ$) los electrones son ionizados violentamente, cuando el proyectil y el blanco están cerca, y se hallan durante toda su evolución más próximos al proyectil que al blanco. En cambio hacia

¹⁴ Ionización de punto de ensilladura.

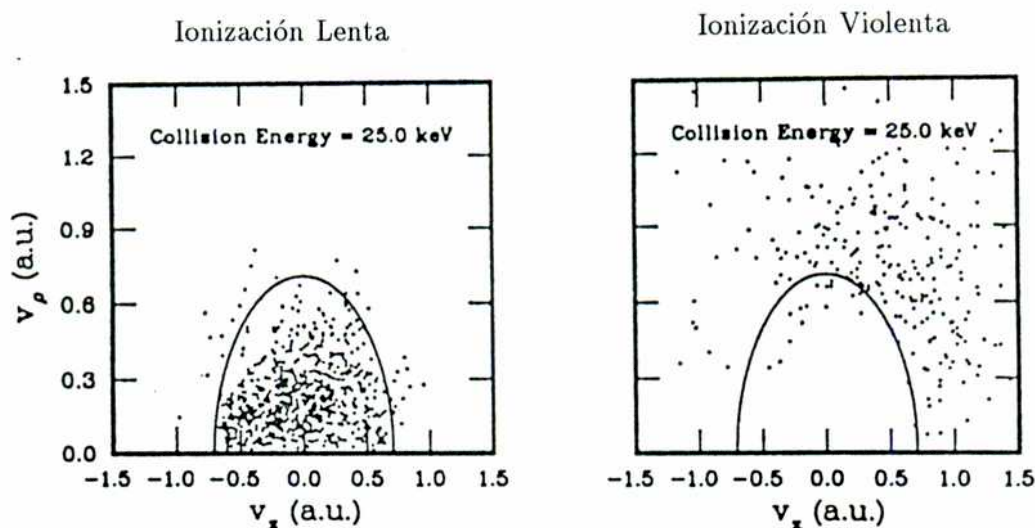


Figura 1.16: (Bandarage y Parson 1990) Velocidad final asintótica relativa al centro de masa de 1000 trayectorias separadas en los diferentes regímenes. v_ρ y v_z son las componentes de la velocidad electrónica en la dirección perpendicular y paralela a la de incidencia en el sistema centro de masa respectivamente. La falta de nitidez en la separación de ambos regímenes se debe a que se pasa de uno a otro en forma más o menos continua. La energía de colisión indicada es la del proyectil y el blanco en el sistema centro de masa, es decir que $v_i = 0.707$ ua.

atrás ($\theta' > 90^\circ$) los electrones viajan entre el proyectil y el blanco bajo la influencia comparable de ambos centros, con una evolución lenta que pasa por infinitud de estados intermedios antes de alcanzar su estado final.

1.3.4 Comparación con Resultados Experimentales

Para el sistema $H^+ \rightarrow He$, presentamos todos los resultados teóricos y experimentales disponibles para el rendimiento del pico y su asimetría divergente.

Observamos que, para el rendimiento del pico, existe un buen acuerdo general entre las diferentes aproximaciones entre sí y con los datos experimentales. La única salvedad es la aproximación de Brinkman-Kramers, que sobrestima el rendimiento del pico en todo el rango de velocidades v_i .

Por otra parte, la dispersión de resultados para la asimetría divergente es tan grande que poco es lo que puede afirmarse positivamente.

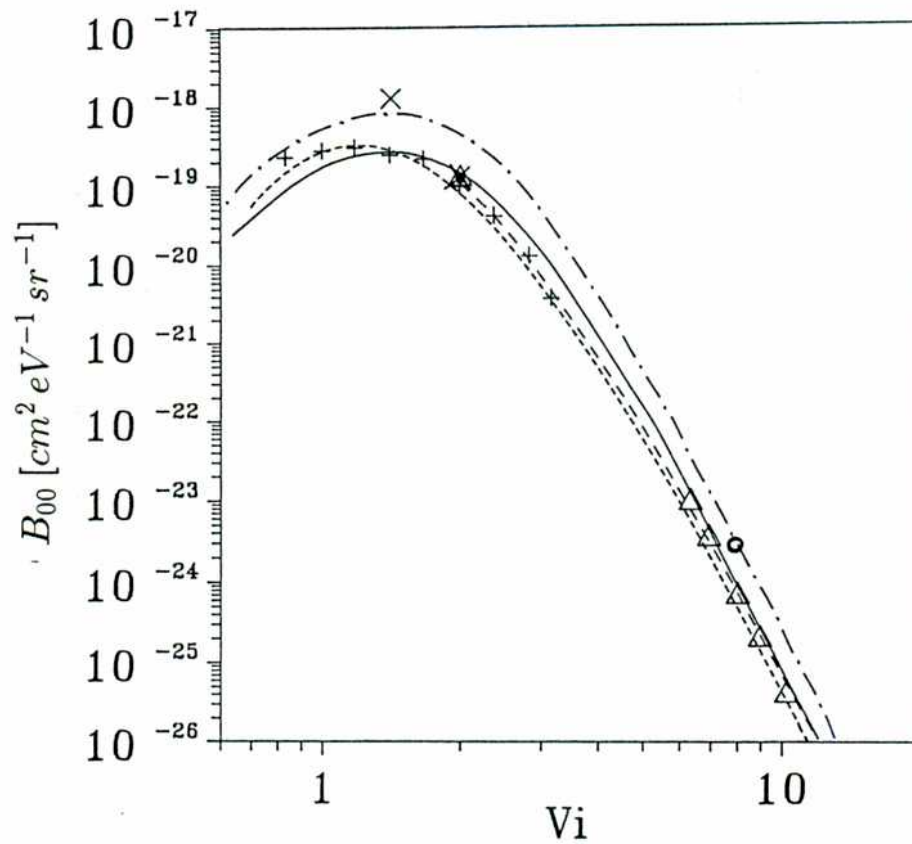


Figura 1.17: B_{00} para $H^+ \rightarrow He$. Resultados teóricos y experimentales.

Resultados Teóricos:

- (- · -): Brinkman-Kramers (Moiseiwitsch 1991)
- (—): Segunda aproximación de Born (Moiseiwitsch 1991)
- (--): CDW (Fainstein 1993)
- (- - -): CDW-EIS (Fainstein 1993)
- (●): IA (Miraglia y Macek 1991)
- (×): CTMC (Reinhold y Olson 1989)
- (○): DSPB (Brauner y Macek 1992)

Resultados Experimentales:

- (+): Dahl (1985)
- (Δ): Andersen *et al* (1986)

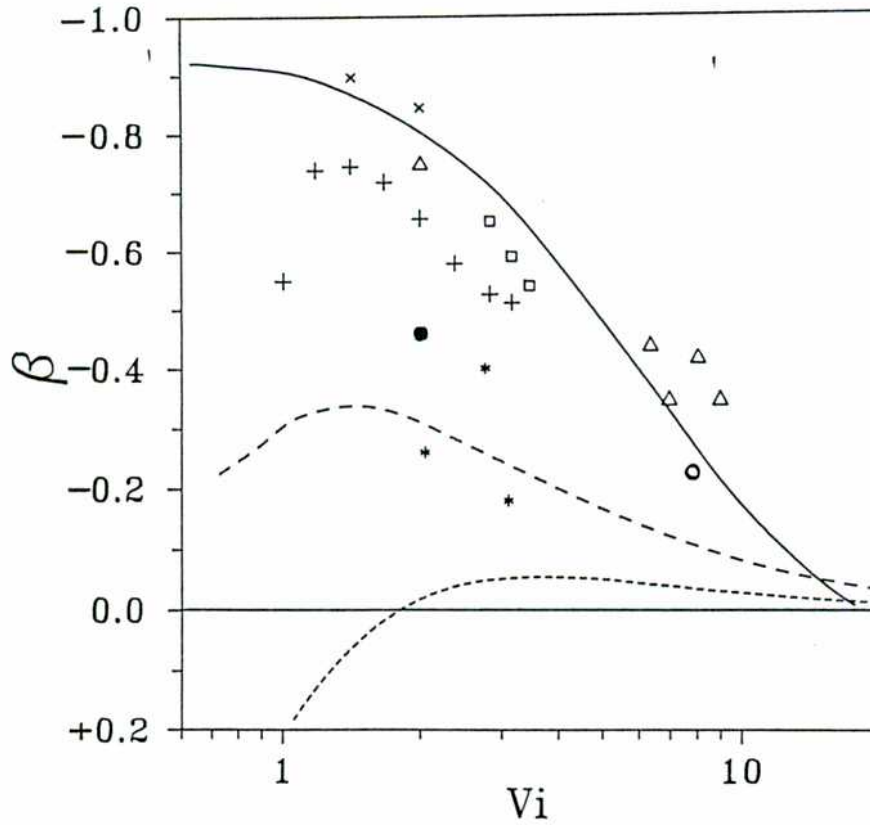


Figura 1.18: β para $H^+ \rightarrow He$. Resultados teóricos y experimentales.

Resultados Teóricos:

- (—): Segunda aproximación de Born (Moiseiwitsch 1991)
- (--): CDW (Fainstein 1993)
- (- · -): CDW-EIS (Fainstein 1993)
- (●): IA (Miraglia y Macek 1991)
- (×): CTMC (Reinhold y Olson 1989)
- (○): DSPB (Brauner y Macek 1992)

Resultados Experimentales:

- (+): Dahl (1985)
- (Δ): Andersen *et al* (1986)
- (*): Meckbach *et al* (1981)
- (\square): Gulyás *et al* (1990)

1.4 Cuestiones Adicionales

En esta sección discutiremos tres temas que intentan aclarar el origen físico del pico divergente y de sus asimetrías.

1.4.1 Continuidad con la Captura

Desde los mismos orígenes del tema, fue señalado que el pico de ECC puede visualizarse como una continuación suave, a través del límite de ionización, de la captura a estados ligados del proyectil (Rudd y Macek 1972). Además, la continuidad puede establecerse como una correspondencia entre la captura a estados Rydberg de un dado impulso angular l , y los parámetros del mismo l del desarrollo del pico de ECC (ecuación 1.8) (Lucas *et al* 1980). La densidad de estados ligados del proyectil es $(dn/dE') = n^3/Z_p^2$ mientras que para los estados del continuo es $(dv'/dE') = 1/v'$. Si $(d\sigma/dE')$ es una función suave a través del límite de ionización, resulta que deben ser iguales los límites:

$$\lim_{E' \rightarrow 0^-} \left(\frac{d\sigma}{dE'} \right) = \frac{n^3}{Z_p^2} \left(\frac{d\sigma}{dn} \right) \quad (1.43)$$

$$\lim_{E' \rightarrow 0^+} \left(\frac{d\sigma}{dE'} \right) = \frac{1}{v'} \left(\frac{d\sigma}{dv'} \right) = 4\pi B_{00} \approx 4\pi v' \left(\frac{d\sigma}{dv} \right) \quad (1.44)$$

donde hemos supuesto que la emisión electrónica es aproximadamente isotrópica en θ' . De estas expresiones podemos extraer varias conclusiones:

- Es un hecho comprobado (Bayfield 1975) que la sección eficaz de captura a estados ligados tiene una dependencia de tipo n^{-3} . De manera que $(d\sigma/dE')$ tiene un valor finito conocido.
- La sección eficaz de ionización $(d\sigma/dv)$ es proporcional a $1/v'$ lo que origina el pico divergente de la ionización.
- De la igualdad de las expresiones (1.43) y (1.44) podemos establecer una relación cuantitativa entre el pico de ECC y la captura a estados Rydberg:

$$B_{00} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n^3}{4\pi Z_p^2} \left(\frac{d\sigma}{dn} \right) \quad (1.45)$$

que fue verificada tanto desde el punto de vista teórico como experimental (Dubé y Salin 1987, Rødbro y Andersen 1979).

Podemos observar que la existencia del pico de ECC es una consecuencia de la interacción coulombiana del proyectil y su estrecha vinculación con la ley n^{-3} de captura a estados Rydberg. Pero es necesaria una descripción más detallada para dar cuenta de las asimetrías.

Desde un punto de vista más fundamental, la continuidad de las matrices de transición de ionización y captura es resultado de la continuidad de las mismas funciones de onda (Salin 1987). Si $\Psi_{v'lm}$ es la onda parcial del continuo de velocidad v' y Ψ_{nlm} es la función de onda de un estado Rydberg de números cuánticos nlm , la continuidad de las probabilidades por unidad de energía para un estado lm en \mathbf{r} se expresa como (Burgdörfer 1984, 1986 y Salin 1987):

$$\lim_{v' \rightarrow 0} v' |\Psi_{v'lm}(\mathbf{r})|^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n^3}{Z_P^2} |\Psi_{nlm}(\mathbf{r})|^2 \quad (1.46)$$

La anisotropía del pico de ECC puede ser descripta en términos de las poblaciones y coherencias de las diferentes ondas parciales que contribuyen al estado final. Burgdörfer (1983, 1984, 1986) desarrolla un formalismo de matriz densidad para estudiar la captura a estados de Rydberg. Expresa la población de los estados en término de valores medios de los *multipolos estadísticos* U_q^k , que son una generalización de los parámetros de orientación y alineamiento introducidos por Fano y Macek (1973). En el límite $n \rightarrow \infty$, los operadores U_q^k son proporcionales a los tensores A_q^k , multipolos del vector de Runge-Lenz $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p}) - Z_P \hat{\mathbf{r}}$ que es una constante de movimiento. En su trabajo, Burgdörfer muestra la continuidad entre la captura a estados ligados y la *parte divergente* del pico de ECC, estableciendo una interpretación física para los parámetros divergentes del desarrollo paramétrico (ecuación 1.8):

$$B_{0l} \propto \langle A_0^l \rangle \quad (1.47)$$

En particular el parámetro β de asimetría divergente resulta ser:

$$\beta = \lim_{n \rightarrow \infty} -\frac{2Z_P}{n^2} \langle d_z \rangle \quad (1.48)$$

donde \mathbf{d} es el momento dipolar de la distribución electrónica más el proyectil. Esta conexión entre la asimetría divergente del pico y el momento dipolar nos indica que el valor negativo de β en el pico de ECC está vinculado con una distribución de carga del sistema electrón-proyectil desplazada *hacia atrás* del proyectil, en el estado final.

1.4.2 Un fenómeno cuántico

Como se deduce de las ecuaciones (1.43) y (1.44), para que exista el pico de ECC, es necesario que $E' = 0$ sea un punto de acumulación de estados ligados al potencial del proyectil. Clásicamente esto siempre sucede, de manera que es posible que la divergencia ($1/v'$) que obtienen Reinhold y Olson 1989 mediante el cálculo de CTMC aparezca siempre, independientemente del potencial considerado.

Presentaremos dos argumentos que señalan como indispensable una descripción *puramente cuántica* del pico.

En primer lugar, la continuidad entre las funciones de onda ligadas y del continuo expresada en la ecuación (1.46), vale en la región *no clásica* de los estados de Rydberg. La parte clásica de la órbita corresponde a $r \approx n^2/Z_P$ mientras que (1.46) es correcta sólo para $r \ll n^2/Z_P$. Esto señala que es la 'parte cuántica' de la función de onda la que se necesita para dar una descripción adecuada de esta zona de la ionización y la captura (Este argumento es presentado por Salin en su trabajo de 1987).

En segundo lugar, de acuerdo con la teoría de interacción en el estado final (Gillespie 1964, Taylor 1972), para pequeños valores de v' la sección eficaz puede aproximarse por la primera aproximación de Born, multiplicada por un 'factor de acrecentamiento' que depende del potencial del proyectil (Garibotti y Barrachina 1983a, b):

$$\left(\frac{d\sigma}{dv}\right) = \frac{1}{|f_0(v')|^2} \left(\frac{d\sigma}{dv}\right)_{B1} \quad (1.49)$$

donde f_0 es función de Jost de onda s para la interacción electrón-proyectil. La función de Jost puede ser definida como la inversa de la función del continuo electrón-proyectil (con normalización δ en el espacio de momentos) evaluada en el origen (Taylor 1972):

$$\frac{1}{f_0(v)} = (2\pi)^{3/2} \Psi_{\mathbf{v}}^+(r=0) \quad (1.50)$$

Para un potencial coulombiano puro de carga Z_P el factor de acrecentamiento de la sección eficaz es de la forma:

$$\frac{1}{|f_0(v')|^2} = |N(Z_P/v')|^2 \quad (1.51)$$

que origina el pico divergente y tiene la misma forma que las expresiones de Salin (1.1), la de Brinkman–Kramers (1.27) y la de Dispersión Múltiple sin interacción internuclear (1.30).

Cuando la función de Jost vale cero cerca del eje real, la matriz de dispersión S tiene un polo, y estamos en presencia de una resonancia. La función f_0 tiene ceros sobre el eje imaginario **positivo** en las posiciones ik_n para cada estado ligado de energía $-k_n^2/2$ (Taylor 1972). Para el potencial coulombiano, hay infinitos estados ligados próximos a $E' = 0$. Desde este punto de vista, el pico divergente aparece debido a una resonancia de energía cero con los infinitos estados de Rydberg. Un fenómeno esencialmente cuántico.

Otra consecuencia de este enfoque es que, en caso de tener un potencial apantallado, el factor de acrecentamiento toma un aspecto muy diferente. Ilustramos esto en la próxima subsección.

1.4.3 Captura al Continuo de Projectiles Neutros

En el caso de tener una colisión de proyectiles neutros sobre blanco gaseoso, y medir los electrones emitidos en coincidencia con los proyectiles neutros a la salida de la colisión, el potencial del proyectil está apantallado en el estado final. El comportamiento de baja energía de la función de Jost está dado por:

$$f_0(v') \propto \frac{1 + iav'}{a} \quad (1.52)$$

donde a es la longitud de dispersión de la onda s para la interacción electrón–proyectil neutro¹⁵. Entonces, la sección eficaz resulta proporcional a:

$$\frac{1}{|f_0(v')|^2} \propto \frac{a^2}{1 + a^2v'^2} \quad (1.53)$$

para v' pequeño. Luego, puede existir un pico de ECC aún en ausencia de la interacción de largo alcance, pero en general tendrá una forma Lorentziana muy ancha. Sólo se hará agudo si la longitud de dispersión a es grande. En particular si $a = \infty$ (una resonancia de energía cero) la sección eficaz presenta una divergencia de tipo $1/v'^2$. En realidad difícilmente la longitud de dispersión sea infinita, pero puede ser muy grande

¹⁵La longitud de dispersión de la onda s se define como $a = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0(k)}{k}$ donde δ_0 es el corrimiento de fase de la onda s (ver Taylor 1972)

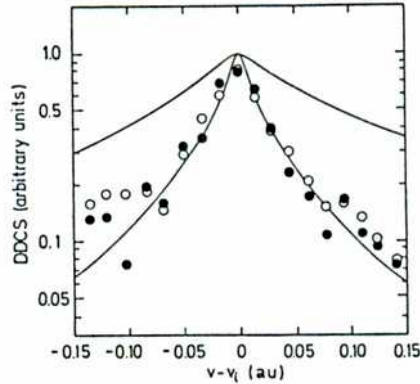


Figura 1.19: (Barrachina 1990) SEDD para ionización $\theta = 0^\circ$ de $He(2^1S) + T \rightarrow He(2^1S) + T^+ + e^-$ a 75 keV/amu. Los datos experimentales (Sarkadi *et al* 1989) son con blancos de (o): *He* y (o): *Ar*. Curva inferior: Teoría de interacción en el estado final para blancos de *He*. Curva superior: comportamiento Coulombiano $1/v'$.

en dos casos: cuando existe un estado ligado de muy baja energía de ligadura, o en la presencia de un estado ‘virtual’ representado por un cero de la función de Jost en el eje imaginario negativo.

Barrachina (1990) propone que los picos de ECC encontrados experimentalmente con proyectiles neutros de *He* (Sarkadi *et al* 1989) se deben a un estado virtual del sistema $e - He(2^1S)$ que tiene una longitud de dispersión del orden de $a \approx 330 \text{ ua}$ (Nesbet 1980). Esta explicación conduce a picos mucho más agudos que $1/v'$ y están en excelente acuerdo con los resultados experimentales (figura 1.19).

Capítulo 2

Método Experimental

- Ahora quiero que comprendan ustedes claramente que, al apretar esta palanca, se envía la máquina a planear en el futuro y esta otra invierte el movimiento. Este soporte representa el asiento del viajero a través del tiempo. Dentro de poco voy a mover la palanca, y la máquina partirá. Se desvanecerá, se adentrará en el tiempo futuro, y desaparecerá. Mírenla a gusto. Examinen bien la mesa, y convézanse ustedes mismos de que no hay trampa. No quiero desperdiciar este modelo, y que luego me digan que soy un charlatán.

Herbert George Wells, La máquina del tiempo.

2.1 El Equipo

En primer lugar, haremos una descripción general del equipo. En la figura 2.1 se encuentra un diagrama explicativo de lo que sigue.

Utilizamos el Acelerador 'Kevatrón' instalado en el Centro Atómico Bariloche, división Colisiones Atómicas, en funcionamiento desde 1964 (CNEA 1964). Es de tipo Cockroft-Walton de una etapa. La fuente de alta tensión es capaz de brindar hasta 300 kV.

La fuente de iones es de tipo radiofrecuencia (Thonemann 1946). Consiste en una descarga gaseosa en una botella de vidrio excitada por un circuito resonante de 20 Mhz. Se pueden extraer corrientes de hasta 50 μA de iones livianos.

El haz de iones es acelerado verticalmente para ser desviado 90° por un imán cuyo

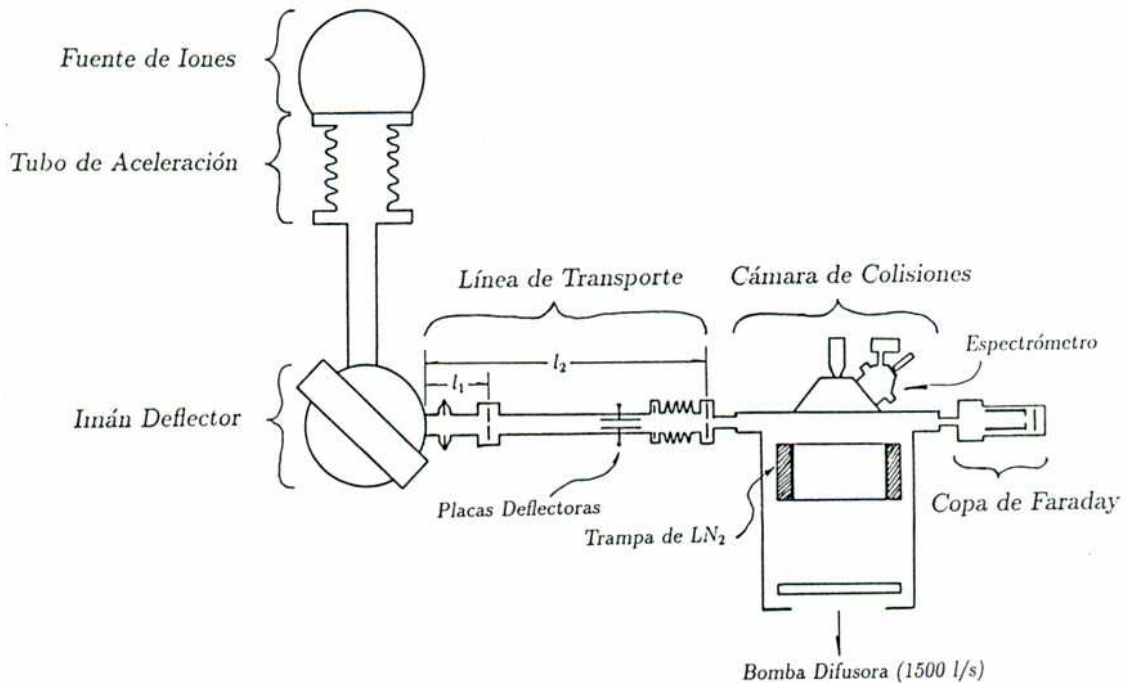


Figura 2.1: Diagrama general del equipo.

radio de deflección es de 50 cm y con un campo máximo de 5000 Gauss.

El haz atraviesa una línea de transporte que posee dos diafragmas que definen la dispersión angular espacial y en energía. La presión en la línea de transporte es de $2 \cdot 10^{-6}$ torr.

A continuación se encuentra la cámara de colisiones que es cilíndrica y tiene circunscrita una trampa anular de Nitrógeno líquido para mejorar las condiciones del vacío con un mínimo de reducción de la velocidad de bombeo. En la cámara se encuentra el blanco gaseoso, que consiste en un chorro de gas eyectado por una aguja hipodérmica ubicada muy cerca del haz. Sobre la tapa superior está montado el espectrómetro de electrones, de forma tal que puede rotar sobre su centro. En la cámara, la presión de base (sin blanco), es $2 \cdot 10^{-7}$ torr.

A la salida de la cámara de colisiones se encuentra una copa de Faraday, que recoge el haz y cuya señal se utiliza para la normalización de los espectros. Se encuentra polarizada positivamente para evitar que escapen los electrones secundarios. Las corrientes típicas en nuestras mediciones fueron entre 0.5 nA y 10 nA.

2.1.1 El Haz

Como el pico de ECC es divergente en función de la velocidad del proyectil, resulta crítica la estabilidad de la energía del haz. La misma debe ser del orden de la resolución en energía del espectrómetro (0.4%) durante el lapso de tiempo necesario para la medición de la SEDD (típicamente unas 12 horas). La selección energética del haz está resuelta por el imán deflector y los diafragmas colimadores de la línea de transporte. Estudiaremos esta cuestión mediante un modelo geométrico, en base al diagrama de la figura 2.2.

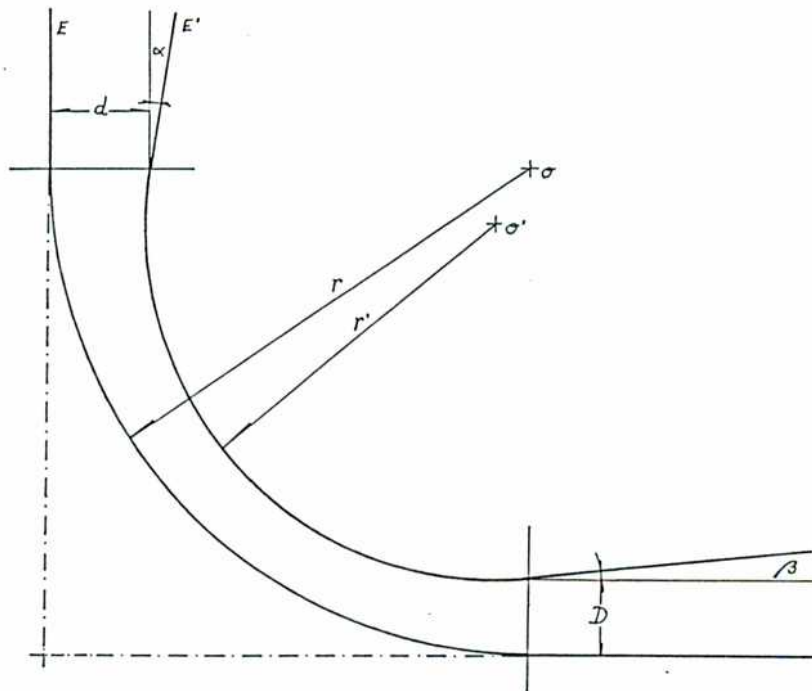


Figura 2.2: Trayectorias en el imán deflector.

El imán se encuentra 'sintonizado' para que aquellos iones que entren con la energía 'correcta' E , en la posición central y en la dirección exactamente vertical, describan un cuarto de circunferencia de radio $r = 50$ cm, para salir exactamente horizontales, centrados con la línea de transporte del haz. Más generalmente, consideremos iones que ingresan al sistema apartados del centro del imán una distancia d , con un ángulo α y con una diferencia de energía ΔE . Como los polos del imán son paralelos, la trayectoria de estos iones será de todas maneras circular, pero emergerán con una desviación D y

un ángulo β respecto del eje de la línea de transporte del haz.

Estudiando la dispersión a primer orden del sistema deflector, la relación entre los parámetros de entrada y salida de un haz de iones verifican la relación lineal (Enge 1967):

$$\begin{cases} D = -r \left(\alpha + \frac{1}{2} \frac{\Delta E}{E} \right) \\ \beta = \frac{d}{r} + \frac{1}{2} \frac{\Delta E}{E} \end{cases} \quad (2.1)$$

Antes de ingresar a la cámara de colisiones, el haz debe pasar a través de los diafragmas colimadores de la línea de transmisión. Los diafragmas tienen un diámetro $\phi = 0.5$ mm y están ubicados a distancias $l_1 = 46$ cm y $l_2 = 107$ cm de la salida del imán (figura 2.1). La condición para que el haz atraviese la línea de transmisión puede expresarse:

$$\begin{cases} |D + l_1\beta| < \phi/2 \\ |D + l_2\beta| < \phi/2 \end{cases} \quad (2.2)$$

Combinando las ecuaciones (2.1) y (2.2) podemos deducir que:

$$\begin{cases} |\beta| < 0.05^\circ \\ \left| \frac{\Delta E}{E} \right| < 0.0016 + 2|d|/r \end{cases} \quad (2.3)$$

De esta última expresión podemos observar que para obtener una resolución en energía del orden de 0.4%, d debe ser del orden de 1 mm. Por ese motivo colocamos un diafragma de 1 mm en la entrada del imán.

Sin embargo, para que esta resolución sea alcanzada, el campo magnético del imán deflector B debe ser lo suficientemente estable. Como $B r \propto \sqrt{E}$, entonces B debe mantenerse constante al 0.2%. Para verificar esto, medimos las fluctuaciones temporales del campo magnético con un equipo de Resonancia Magnética Nuclear. El resultado se muestra en la figura 2.3. Se observa que el sistema tarda unas 10 horas en estabilizarse, y luego la dispersión resulta del orden del 0.05% que es suficiente para nuestros propósitos. Con este motivo, el imán fue encendido el día previo a cada medición.

A modo de verificación, medimos un espectro a 0° de ionización del proyectil (pico de ELC) para la colisión $H^0 \rightarrow He$ a 100keV. Apagamos todo el equipo menos el imán y al día siguiente volvimos a realizar la medición (figura 2.4). La energía del haz no había variado en una magnitud detectable por el equipo.

La divergencia angular del haz está indicada en la ecuación 2.3. Entre el blanco gaseoso y el último diafragma de la línea de transporte de haz hay 23 cm, a lo largo

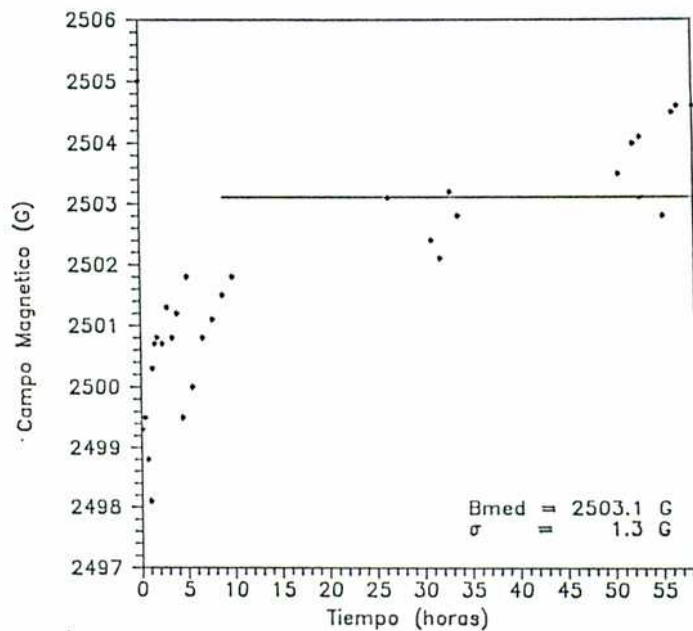


Figura 2.3: Estabilidad del campo magnético del imán deflector, medida con un equipo de RMN. Se indica el campo medio $\langle B \rangle$ y la desviación estándar σ de los valores obtenidos a partir de 10 horas.

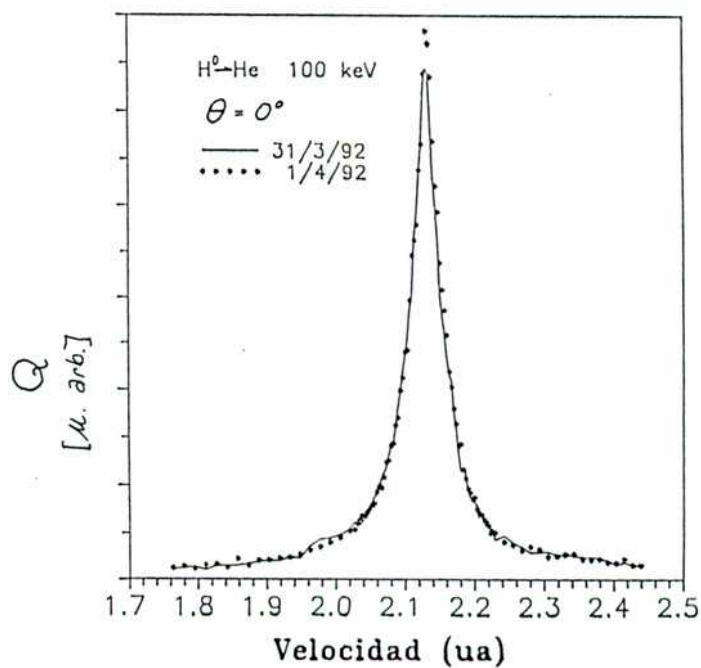


Figura 2.4: Espectros a 0° tomados en dos días consecutivos. Todo el equipo fue apagado menos el imán deflector.

de los cuales el mismo se ensancha 0.4 mm por sobre su diámetro en el diafragma, producto de su divergencia angular. El haz en el blanco tiene entonces un diámetro menor que 0.9 mm.

Antes de la entrada a la cámara de colisiones, se encuentran un par de placas deflectoras que permiten desviar la componente cargada del haz, para poder observar la porción del haz que es neutralizado en la línea de transporte. Esto es importante puesto que la sección eficaz de ELC producida por H^0 es varias veces mayor que la de ECC del H^+ . El fondo de electrones al polarizar las placas deflectoras resultó ser menor que el 1% en la zona del pico de ECC.

Resumiendo: el haz en el blanco tiene un diámetro menor que 0.9 mm, una dispersión angular menor que 0.05° , una dispersión en energía menor que 0.1% y una contaminación de H^0 que influye en los espectros con un fondo menor que 1%.

2.1.2 El espectrómetro

Presentamos un diagrama general del espectrómetro en la figura 2.5. Es un analizador de electrones electrostático con dos electrodos cilíndricos coaxiales inclinados 42.3° respecto de la dirección del haz. El conjunto está montado en forma rotable sobre la tapa de la cámara de colisiones, lo que permite seleccionar los electrones emitidos con un ángulo θ respecto del haz en todo el rango $-180^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$, salvo algunas regiones 'ciegas' impuestas por el diseño que se dispusieron a distintos ángulos positivos y negativos, de manera que podemos estudiar completamente la emisión electrónica. El blanco gaseoso está centrado en el eje de rotación del espectrómetro, de tal forma que no hay obstáculos entre el blanco y la entrada de la bomba de vacío que se encuentra en la parte inferior de la cámara de colisiones.

Este diseño resuelve dos problemas. En primer lugar, al rotar el conjunto del espectrómetro la configuración de los campos eléctricos no se altera. Así la influencia de distorsiones en los campos resulta ser la misma para todos los ángulos, evitando la aparición de estructuras espúreas en la SEDD (Goñi *et al* 1986, Suárez *et al* 1988). En segundo lugar, minimiza el efecto de blanco extendido gracias a un bombeo efectivo en la región de la aguja que inyecta el gas y a la proximidad con que se encuentra ubicada la aguja del haz.

El foco de entrada del analizador se encuentra en la intersección del haz, el eje vertical de rotación del espectrómetro y el eje de los electrodos cilíndricos. Los electrones

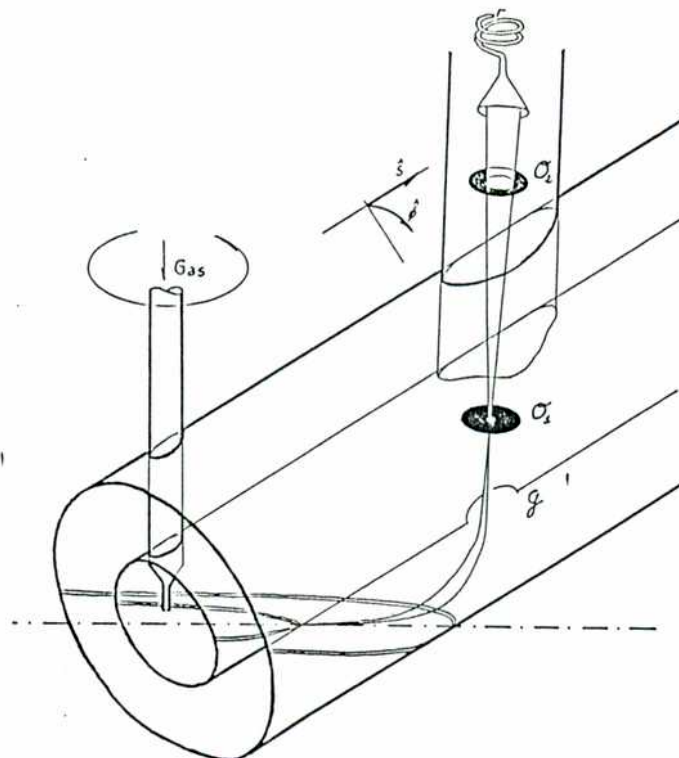
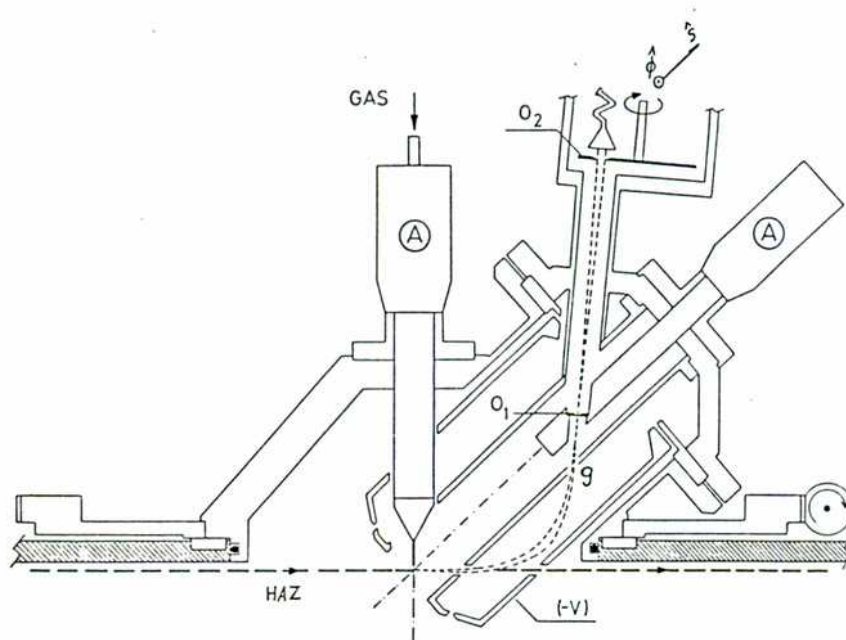


Figura 2.5: Diagramas generales del espectrómetro. Dos vistas diferentes.

emitidos son deflectados por el campo eléctrico radial que existe entre los cilindros y son enfocados nuevamente en el eje de los electrodos. Allí atraviesan el orificio \mathcal{O}_1 de 0.5 mm de diámetro. La aceptación angular está determinada por una serie de seis diafragmas intercambiables \mathcal{O}_2 que permiten seleccionar $\theta_0 = 0.25^\circ, 0.5^\circ, 1.0^\circ, 1.5^\circ, 2.0^\circ$ y 2.5° .

La resolución en velocidad es $R=0.2\%$. La calculamos utilizando los parámetros del diseño del espectrómetro (Risley 1972). La constante del analizador está definida como la constante de proporcionalidad entre la energía de los electrones detectados y la tensión aplicada entre los electrodos. Determinamos su valor $C = (0.61 \pm 0.02) \text{ V/eV}$, utilizando mediciones del pico de autoionización del He (Mosconi 1991).

Colectamos los electrones con un detector tipo 'channeltron', mantenido a una diferencia de potencial de +100 V para preacelerar los electrones y trabajar en un rango de energías donde la eficiencia de detección es aproximadamente constante. Para que el campo eléctrico sea uniforme a la entrada del channeltron, el orificio \mathcal{O}_2 está cubierto por una fina malla de transmisión mayor que 99%.

Con una bobina convenientemente orientada, logramos reducir el campo magnético terrestre a un valor menor que 10 mG sobre toda la trayectoria de los electrones.

2.1.3 Enfoque del Espectrómetro

El diseño del espectrómetro está realizado de tal forma que todos aquellos electrones de igual energía que ingresan al analizador pasando por un punto del eje de los cilindros, son enfocados nuevamente sobre otro punto del mismo eje. Esta propiedad permite utilizar distintas resoluciones angulares, prácticamente sin afectar la resolución en energía.

Según la dirección azimutal de los electrodos $\hat{\phi}$ (figura 2.5) el enfoque está asegurado completamente por la simetría cilíndrica del equipo. En la dirección perpendicular \hat{s} el enfoque está asegurado hasta un segundo orden por los parámetros del diseño: el radio de los cilindros y el ángulo de inclinación del eje (Risley 1972).

Para verificar el enfoque del espectrómetro, realizamos la siguiente prueba. Elegimos una región de la SEDD que podemos considerar aproximadamente constante dentro de una región del orden del volumen de resolución del equipo: $\theta = 20^\circ$, $v = 1.24 \text{ ua}$ para la colisión $H^+ \rightarrow He$ a una velocidad de 2 ua. Utilizando el diafragma \mathcal{O}_2 más pequeño ($\theta_0 = 0.25^\circ$) y desplazándolo según las direcciones $\hat{\phi}$ y \hat{s} , investigamos cuán

uniformemente estaba ‘iluminada’ la región de entrada del Channeltron.

El resultado fue que en la dirección del foco de segundo orden (\hat{s}) la transmisión es aproximadamente constante sobre todo el rango de las posiciones accesibles, entre $\pm 3^\circ$ de ángulo subtendido desde \mathcal{O}_1 . En la dirección $\hat{\phi}$, en cambio, la transmisión variaba fuertemente para una apartamiento del orden de 0.5° (figura 2.6). Esta pérdida de transmisión indicaba que la simetría cilíndrica estaba rota. Suponemos que esto se debe que los campos espúreos introducidos por el orificio \mathcal{G} de 5 mm de diámetro que se encuentra en el cilindro interior. Colocamos sobre \mathcal{G} una pequeña grilla de una transmisión mayor que 99% para minimizar los campos de borde y repetimos la prueba. Los resultados se muestran en las figuras 2.6 y 2.7. Podemos observar que ahora la transmisión es buena hasta un ángulo de 1.5° . La resolución angular para el diafragma de 1° ha mejorado notablemente y la resolución en energía no se ha visto afectada.

2.1.4 Electrones Rydberg

Como resultado de la colisión, también se produce la captura de electrones a estados de Rydberg del proyectil, de muy baja energía de ligadura. Cuando el proyectil ingresa entre las placas del espectrómetro, se ioniza por el campo eléctrico del analizador. Las trayectorias de los electrones originados por este mecanismo tienen las siguientes características:

- La emisión se produce fuera del foco de entrada del espectrómetro. La eficiencia de detección debe ser menor que para los electrones del pico de ECC.
- La emisión se produce dentro del espectrómetro *hacia adelante*. La detección de estos electrones debe estar fuertemente localizada en 0° (del orden de θ_0).
- Los electrones del pico de ECC son deflectados durante toda su trayectoria en el campo del analizador, mientras que los electrones Rydberg atraviesan parte del campo aún ligados al proyectil antes de ser ionizados. Esto provoca que sean detectados a una velocidad aparente mayor que la del proyectil, produciendo una pequeña estructura sobre la cola de alta energía del pico de ECC.
- Dicha estructura se observa en los espectros de $H^+ \rightarrow He$ a 100keV con una diferencia de energía aparente de un 3% respecto al pico de ECC. Esto indica que la longitud del campo que el electrón Rydberg atraviesa ligado es menor que

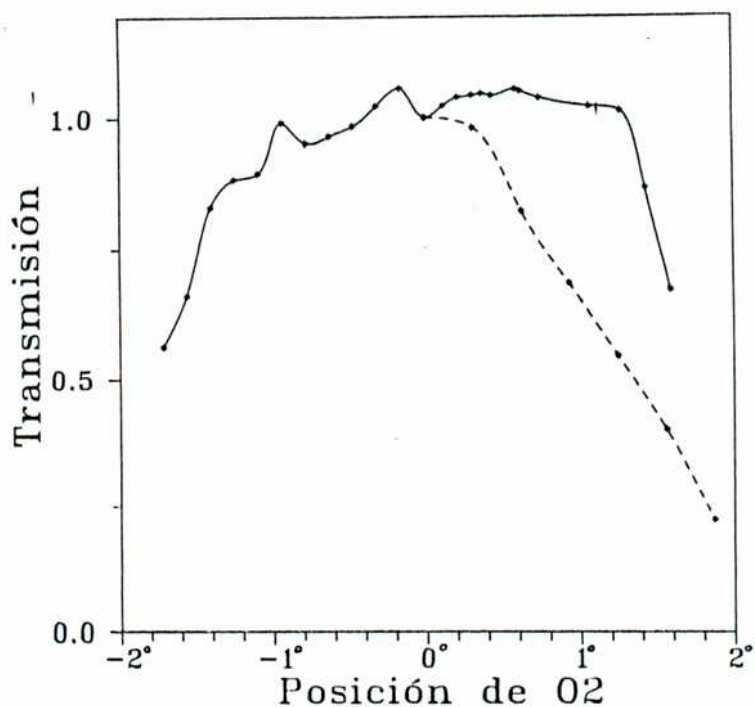


Figura 2.6: Se indica la transmisión de espectrómetro en la dirección ϕ , medida como se indica en el texto. La posición de O_2 está expresada en términos del ángulo subtendido desde O_1 . (- - -): Sin grilla. (—): Con grilla.

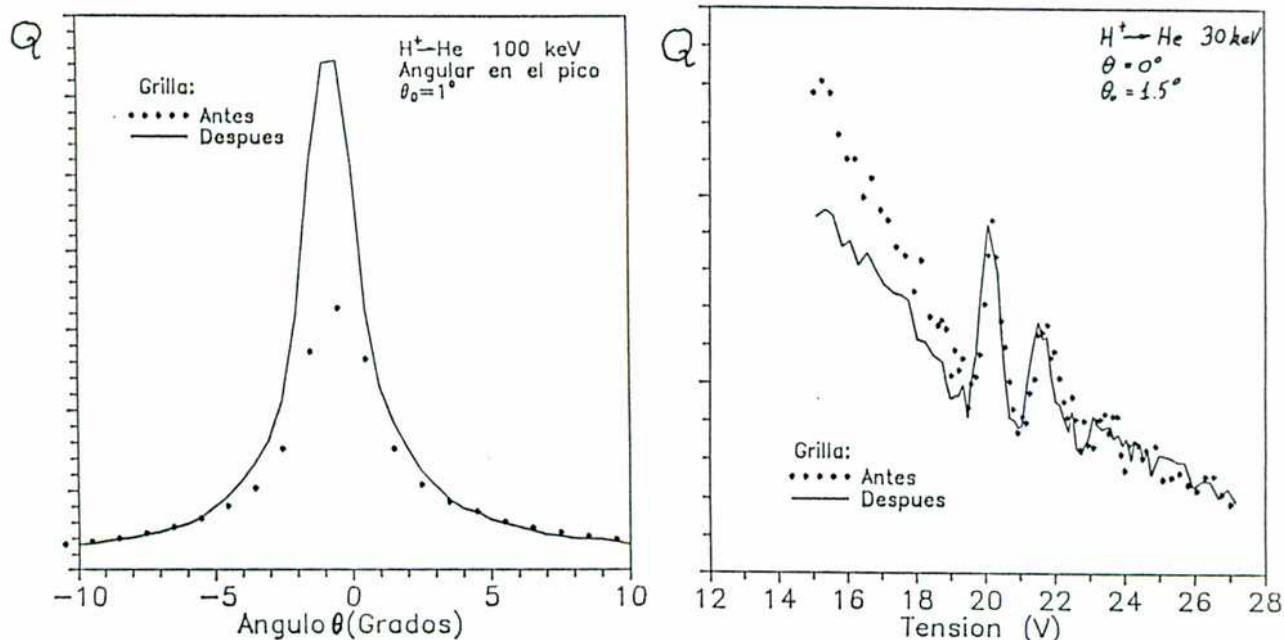


Figura 2.7: Cambios introducidos por la grilla en \mathcal{G} . (a): En la resolución angular. (b): En la resolución en energía (Mosconi 1991). La abcisa indica la tensión entre cilindros del espectrómetro, que es proporcional a la energía de los electrones.

1 mm. Como la ranura de entrada del espectrómetro es de aproximadamente 3 mm de ancho, los electrones Rydberg se producen en los campos de borde de la ranura.

Esta fuente de contaminación de los espectros fue señalada por varios autores (Vager *et al* 1982, 1983, Nemirovsky *et al* 1983). Desenfocando apropiadamente el analizador, pueden en principio estudiarse la población y la vida media de los estados de Rydberg con $n > 400$ (Schramm y Betz 1992).

Los electrones que provienen de este mecanismo, están siempre presentes en los espectros y resultan más notorios al reducir la resolución angular. Esto plantea una objeción adicional al método estándar de procesamiento, ya que se estaría fiteando el pico de ECC mas la estructura debida a los electrones Rydberg con un desarrollo paramétrico diseñado solamente para el pico de ECC. En nuestras mediciones, esta estructura es pequeña, se identifica fácilmente y no afecta el tratamiento de datos, como veremos en el capítulo siguiente.

2.2 La Medición

2.2.1 El Sistema de Adquisición de Datos

El sistema de adquisición de datos se maneja mediante una computadora personal a la que ingresa la información de la corriente de la copa de Faraday y los pulsos digitalizados del Channeltron. El sistema maneja la tensión entre los electrodos del espectrómetro y puede cambiar el ángulo θ de observación mediante el comando de un motor de pasos.

El programa de adquisición de datos permite tomar espectros barriendo la energía electrónica a un ángulo fijo (espectros que llamaremos 'longitudinales') así como también tomar espectros a energía constante barriendo en ángulo (espectros 'angulares').

Para minimizar el efecto de las fluctuaciones del haz, en cada punto del barrido el programa cuenta los pulsos del Channeltron hasta acumular una carga determinada en la copa de Faraday.

2.2.2 La Normalización Angular

El efecto de blanco extendido resulta una fuente de errores sistemáticos que debe ser evaluada cuidadosamente. Como discutimos en la sección 1.2.2 este efecto altera artificialmente la distribución electrónica cerca de 0° que es justamente donde se encuentra el pico de ECC.

Para realizar una correcta normalización angular debe conocerse en forma precisa el perfil de densidades del blanco a través del camino del haz, así como la transmisión del espectrómetro para electrones emitidos fuera del foco en un ángulo arbitrario. Este tipo de análisis, que conduce a un factor de eficiencia angular efectiva, fue llevado a cabo por varios autores (ver por ejemplo: Kuyatt 1968, Toburen 1971, Steckelmacher *et al* 1978, Bernardi *et al* 1984). Sin embargo, resulta demasiado difícil realizar una descripción exacta de los efectos involucrados en este tipo de análisis. Entonces, estos factores angulares suelen compararse con alguna SEDD que tenga una distribución angular conocida (Toburen 1971). Se pueden comparar, por ejemplo, con algunas líneas Auger del Ar que se sabe que son esencialmente isotrópicas para ángulos mayores que 10° (Volz y Rudd 1970). Esto se utilizó frecuentemente para la calibración angular (Kövé

1983, Gulyás 1989). Sin embargo, como indicamos en la sección 1.2.2, la isotropía de la emisión Auger se interrumpe hacia adelante por la presencia del proyectil. Esto conduce a una fuerte subestimación de la SEDD para ángulos pequeños (Barrachina 1992).

Otra actitud a tomar consiste en disminuir la extensión del blanco gaseoso mediante un bombeo eficiente, una aguja delgada o un arreglo multicapilar (Cleff y Mehlhorn 1974, Brinkmann y Trajmar 1981) y disminuyendo al máximo la distancia entre el haz y el extremo de la aguja. De esta manera, los efectos de blanco extendido pueden reducirse lo suficiente en forma experimental, sin aplicar ningún factor de corrección. En nuestro caso, elegimos este criterio, utilizando una presión de base (con blanco encendido) de 6×10^{-6} torr y una distancia de 0.15 mm entre la aguja y el haz. En estas condiciones el efecto de blanco extendido produce un incremento menor que el 5% a 0° , como fuera demostrado con el mismo equipo por Bernardi *et al* (1988).

2.2.3 El Relevamiento de la SEDD

Para relevar la estructura de la SEDD, medimos típicamente unos 22 espectros longitudinales. El rango en velocidad de los mismos fue $v' \leq q v_i$ con $q \approx 0.15$, que resulta suficiente como para alejarnos de la singularidad lo necesario para que la integral de convolución no afecte significativamente la estructura de la SEDD en los extremos de los espectros. La resolución angular que utilizamos fue $\theta_0 = 0.5^\circ$. Como la convolución del detector es importante en la región $v' \leq \theta_0 v_i$, entonces el rango utilizado contiene $q/\theta_0 \approx 60$ veces el tamaño de esta región. Los ángulos medidos cubren aproximadamente el rango $-1.5^\circ \rightarrow 10^\circ$. Cerca de la dirección de incidencia medimos cada 0.2° y más allá de 1.5° vamos aumentando el incremento angular hasta medir cada 1° cerca de los 10° . La densidad de puntos en los espectros longitudinales también varía según la forma de los mismos. Cerca de $\theta = 0^\circ$ tomamos unos 100 puntos mientras que para los ángulos mayores medimos apenas en 10 velocidades. En la figura 2.8 se puede apreciar la densidad de puntos que tomamos en cada región del espacio de velocidades.

La adquisición de los espectros lleva aproximadamente unas 12 horas de medición. En ese lapso pueden producirse fluctuaciones de tiempos largos de algunos parámetros del experimento, como la presión del gas del blanco. Por esto resulta conveniente medir algún espectro angular para normalizar relativamente los espectros longitudinales. Medimos con mucho detalle tres espectros angulares a tres velocidades diferentes.

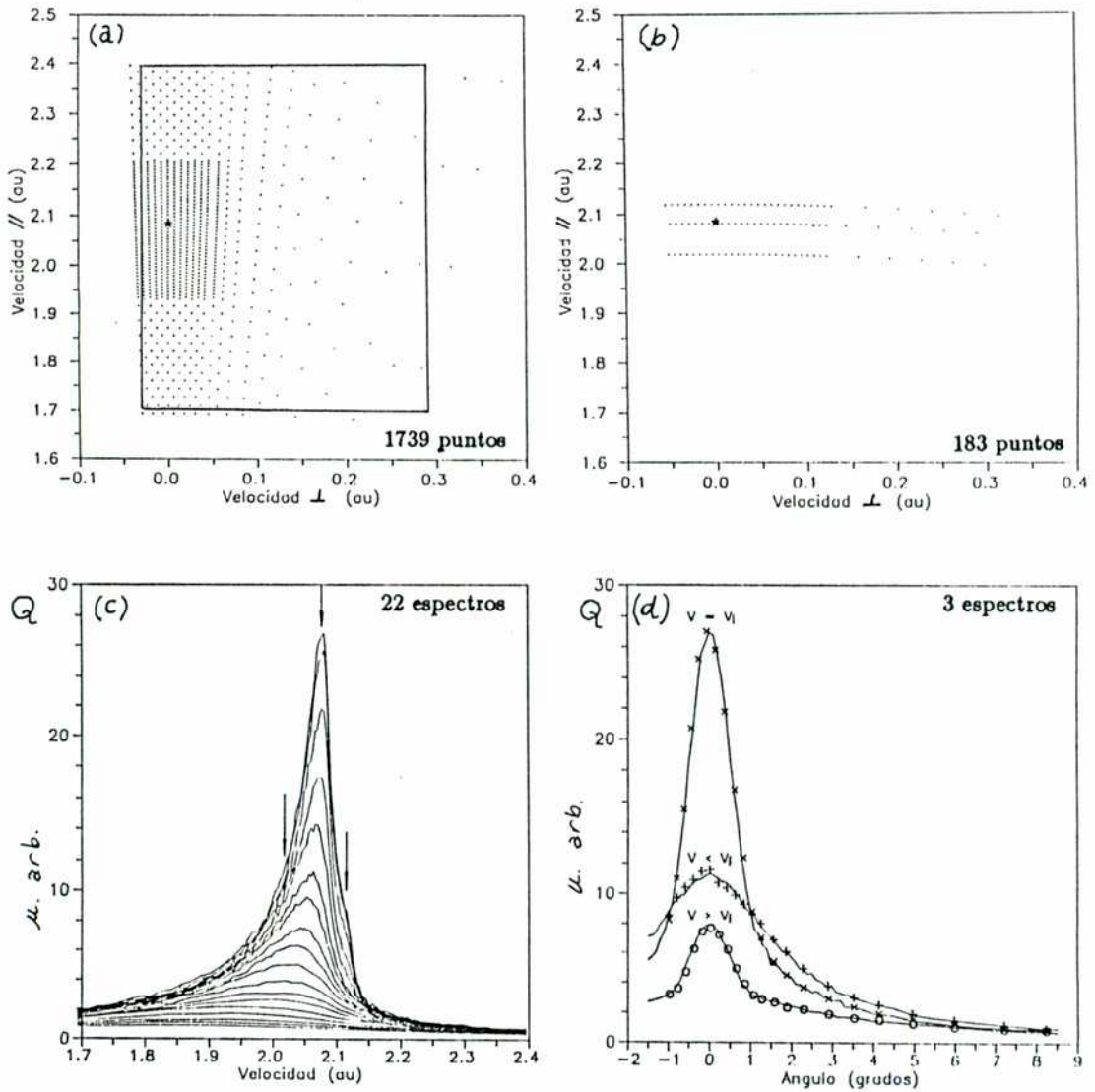


Figura 2.8: Relevamiento de la SEDD para el caso $H^+ \rightarrow He$ a 100 keV.
 (a): Espectros Longitudinales. Se indica sólo la mitad de los puntos en los cuales medimos la SEDD. El recuadro señala los límites exteriores de la grilla. La estrella indica la velocidad del proyectil.
 (b): Espectros Angulares. La estrella indica la velocidad del proyectil.
 (c): Espectros Longitudinales. Las flechas indican las posiciones de los cortes angulares.
 (d): Espectros Angulares. Los símbolos indican los cortes de los espectros longitudinales a la velocidad correspondiente, luego de la normalización.

El objetivo de medir *varios* espectros angulares es verificar la consistencia de la medición, ya que si existe una deformación en alguno de los espectros no será posible empalmar el valor de la sección eficaz en todas las intersecciones. Obtuvimos los factores de normalización para los espectros longitudinales y angulares ajustando por cuadrados mínimos todas las intersecciones en el espacio de velocidades. En todos los casos el factor es aproximadamente uno y representa un pequeño ajuste de los datos originales. El resultado es muy consistente, como puede apreciarse en la figura 2.8.

Una vez normalizadas relativamente las mediciones, resulta útil evaluar la SEDD sobre una grilla equiespaciada de puntos en el espacio de velocidades. Elegimos una grilla de 40×200 puntos. La densidad es del orden de la de los puntos en la zona del pico. Los valores en cada nodo son obtenidos interpolando con los cuatro puntos adyacentes medidos, usando como factor de peso la inversa de la distancia al cuadrado.

De esta manera podemos realizar gráficos tridimensionales del pico de ECC, curvas de nivel así como los diferentes cortes y operaciones que hacen falta para procesar los datos convenientemente (ver el próximo capítulo). Mostramos algunos gráficos de este tipo en la figura 2.9.

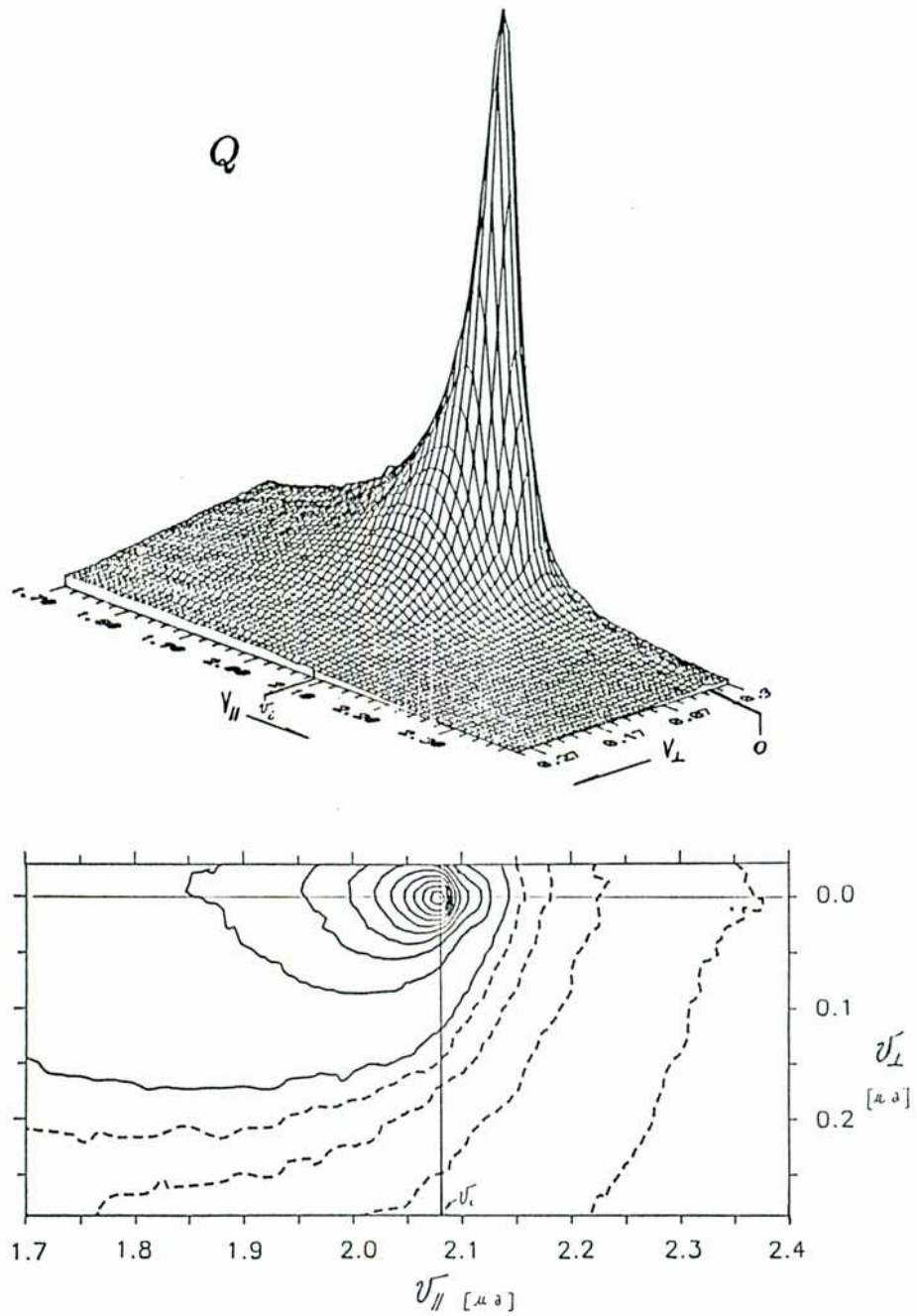


Figura 2.9: Medición de la SEDD para la colisión $H^+ \rightarrow He$ a 100 keV. Dos vistas de $Q(\mathbf{v})$. (a):Superficie. (b) Líneas de Nivel. Se indica con una cruz la velocidad del proyectil.

Capítulo 3

Parametrización en Funciones Angulares y Método de Evaluación

Creo que es verdad que hay una imaginación loca y otra disciplinada, pero no se trata de elegir entre una forma o la otra, sino quizá de ser siempre un loco para empezar y un disciplinado para continuar. Unos deberán esforzarse para lo primero y otros para lo segundo. Creo que hace falta locura para tener una idea buena, y luego disciplina para hacerla triunfar.

Jorge Wagensberg, Sobre la Imaginación Científica.

En este capítulo propondremos una parametrización en funciones angulares así como un método de procesamiento de los datos para extraer información acerca del pico de ECC que sea independiente del detector. Ejemplificaremos cada paso del método utilizando la medición de $H^+ \rightarrow He$ a 100 keV con una resolución de $\theta_0 = 0.5^\circ$.

Desde este punto de vista, presentaremos en forma completa los resultados así las conclusiones finales en el capítulo siguiente.

3.1 Parametrización en funciones angulares

Cuando $v' \ll 1$, la convergencia de la serie de potencias de v' del desarrollo paramétrico (ecuación 1.8) está asegurada. Bastaría considerar los términos con $n = 0$ y 1. Más adelante, demostraremos experimentalmente la validez de este desarrollo. Nuestra propuesta consiste en desarrollar en las proximidades del pico:

$$\frac{d\sigma}{dv} = \frac{B_{(\theta')}}{v'} + A_{(\theta')} \quad (3.1)$$

Las funciones $B_{(\theta')}$ y $A_{(\theta')}$ son funciones angulares que podemos definir en forma general como:

$$\begin{aligned} B_{(\theta')} &= \lim_{v' \rightarrow 0} \left[v' \left(\frac{d\sigma}{dv} \right)_{\theta' = cte} \right] \\ A_{(\theta')} &= \lim_{v' \rightarrow 0} \left[\frac{\partial}{\partial v'} \left\{ v' \left(\frac{d\sigma}{dv} \right)_{\theta' = cte} \right\} \right] \end{aligned} \quad (3.2)$$

La función $F = (d\sigma/dv)v'$ no es divergente pero es multivaluada en $v' = 0$. Las funciones angulares $B_{(\theta')}$ y $A_{(\theta')}$ corresponden al valor límite de F y a la pendiente con que nos acercamos a $v' = 0$ manteniendo θ' constante.

Resulta inmediato obtener funciones angulares a partir de cálculos de la SEDD.

A la función $(B_{(\theta')}/v')$ la llamaremos la parte *divergente* del pico, y a $A_{(\theta')}$ la denominaremos parte *no divergente* del mismo.

Para simplificar la notación, en adelante reemplazaremos $A_{(\theta')}$ y $B_{(\theta')}$ por una notación mas compacta: $A_{\theta'}$ y $B_{\theta'}$.

3.2 Remoción de la Divergencia

Es necesario ahora establecer un método para obtener las funciones $B_{\theta'}$ y $A_{\theta'}$ a partir de los resultados de la medición. Nuestra propuesta consiste en remover el pico de los espectros experimentales. Si la SEDD tiene la forma (3.1) el resultado de la medición puede expresarse como (ver ecuación 1.10):

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{v}) &= \int S(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}) \left(\frac{d\sigma}{dv_1} \right) d^3\mathbf{v}_1 = \\ &= \int S(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}) \left(\frac{B_{\theta'_1}}{v'_1} \right) d^3\mathbf{v}_1 + \int S(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}) A_{\theta'_1} d^3\mathbf{v}_1 \end{aligned} \quad (3.3)$$

Si nos alejamos de la divergencia hasta por lo menos $v' > \theta_0 v_i$, y las funciones $B_{\theta'}$ y $A_{\theta'}$ son suaves dentro del rango de θ'_i en que $S(\mathbf{v}_1, \mathbf{v})$ no es despreciable, resulta:

$$Q(\mathbf{v}) = B_{\theta'} \int S(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}) \left(\frac{1}{v'_1} \right) d^3 \mathbf{v}_1 + A_{\theta'} \int S(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v}_1 \quad (3.4)$$

La primera de las integrales es la convolución de $1/v'$ que es la función U_{00} (ecuación 1.11). La segunda integral es simplemente el volumen de resolución \mathcal{V} (ecuación 1.14). Tenemos entonces que:

$$\frac{Q(\mathbf{v})}{U_{00}(\mathbf{v})} = B_{\theta'} + \frac{A_{\theta'}}{(U_{00}(\mathbf{v})/\mathcal{V})} \quad (3.5)$$

Si nos apartamos de la divergencia en un valor del orden de

$$v'_{lim} = \alpha \theta_0 v_i \quad (3.6)$$

con α entre 1 y 10, podemos aproximar $U_{00} \approx \mathcal{V}/v'$, con lo que obtenemos:

$$\frac{Q(\mathbf{v})}{U_{00}(\mathbf{v})} \stackrel{v' > v'_{lim}}{=} B_{\theta'} + A_{\theta'} v' \quad (3.7)$$

El método que proponemos consiste en realizar el cociente Q/U_{00} y realizar cortes a diferentes valores de $\theta' = cte$. Observando a partir de qué valor se obtienen rectas, establecemos la magnitud de v'_{lim} . La ordenada al origen de las rectas corresponderá a $B_{\theta'}$ y la pendiente a $A_{\theta'}$. La forma del pico de ECC para $v' < v'_{lim}$ no puede extraerse de los datos experimentales porque la función resolución del equipo distorsiona profundamente la información en esta región.

Observemos cómo funciona el método para el espectro de $H^+ \rightarrow He$ a 100 keV ($v_i = 2$ ua).

En primer lugar realizamos el cociente Q/U_{00} . El resultado se muestra en la figura 3.1. Allí podemos observar que en la función cociente, el pico ha sido removido. A una velocidad ligeramente mayor que v_i se observa la pequeña estructura debida a los electrones Rydberg que ya discutimos en el capítulo anterior. La distribución resulta casi constante en un ancho cono hacia adelante (aproximadamente $\theta' < 80^\circ$). Para ángulos mayores se incrementa fuertemente, producto de la asimetría de la distribución. Hacia atrás observamos una 'cresta' sobre la línea $\theta' = 180^\circ$.

Sobre esta distribución, realizamos cortes para siete valores de θ' (cada 30°). El resultado se muestra en la figura 3.2. En la misma podemos observar que efectivamente

obtenemos rectas para $v' > 0.07$ au. Esto corresponde a $\alpha \approx 4$. Se observa que la estructura debida a los electrones Rydberg se ubica fuera de la zona útil, de manera que no afecta el procesamiento de los datos.

El hecho de que obtengamos efectivamente rectas confirma la validez del desarrollo propuesto. La principal ventaja del método consiste en que podemos verificar a simple vista la bondad del ajuste, debido a que estamos realizando un fiteo simplemente con rectas. Por otra parte, el valor que obtenemos para v'_{lim} corresponde a tan sólo 0.1 eV de energía electrónica en el sistema del proyectil.

Finalmente, realizamos cortes para 60 valores de θ' (cada 3°) y ajustamos con rectas para $v' > \alpha\theta_0v_i = 0.1$ au. Los valores obtenidos de la ordenada al origen y de la pendiente de las mismas se muestra en la figura 3.3. Dejamos para más adelante la discusión de estos resultados.

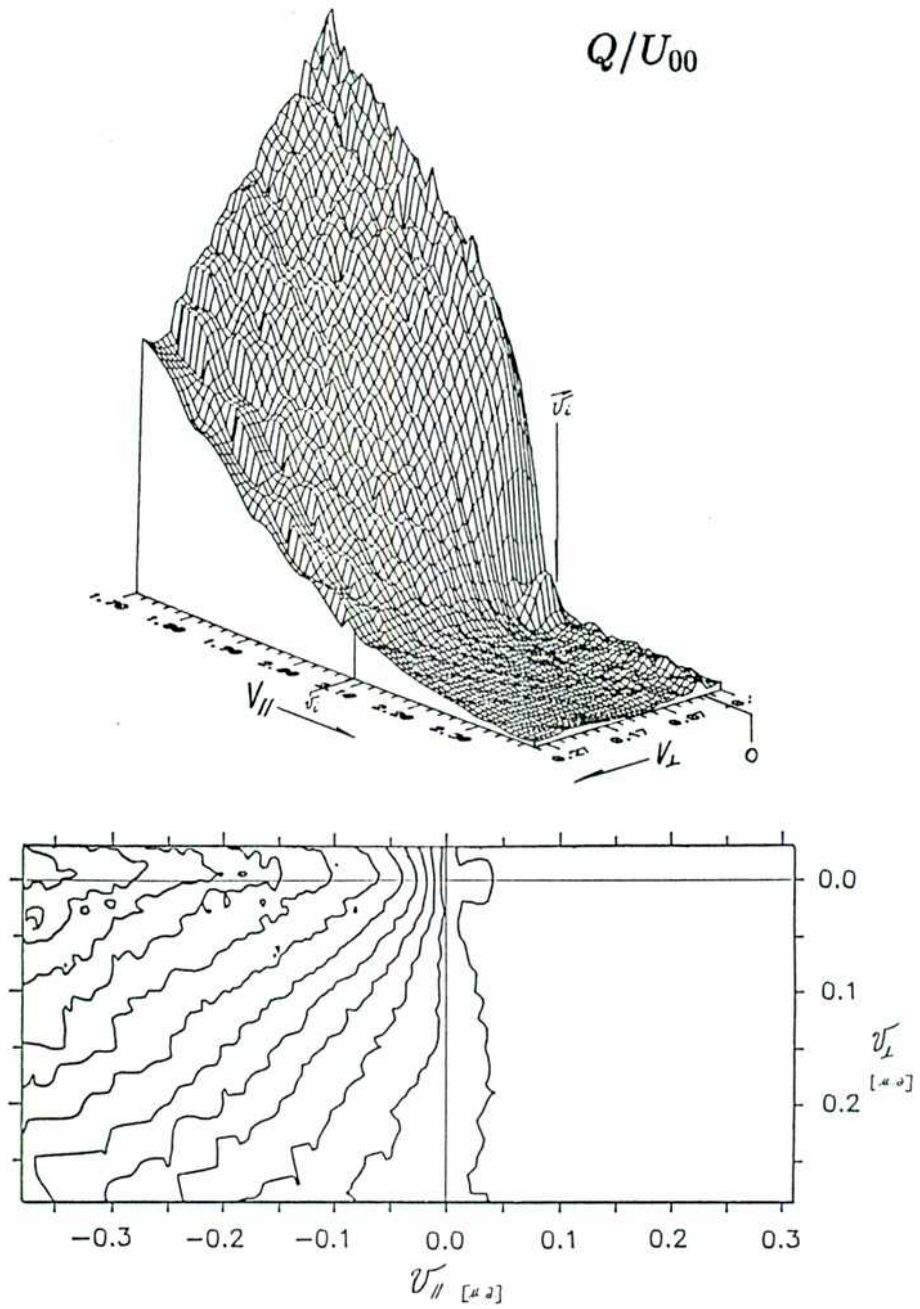


Figura 3.1: Resultados del cociente Q/U_{00} para la colisión $H^+ \rightarrow He$ a 100 keV. (a): Superficie. (b): Curvas de Nivel.

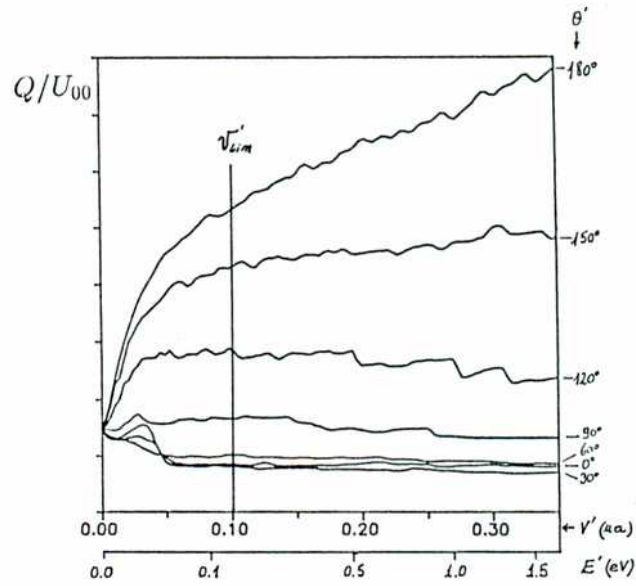


Figura 3.2: Cortes de Q/U_{00} para 7 valores de θ' en la colisión $H^+ \rightarrow He$ a 100 keV. Se observa que están bien descritos por rectas excepto en las proximidades de $v' = 0$.

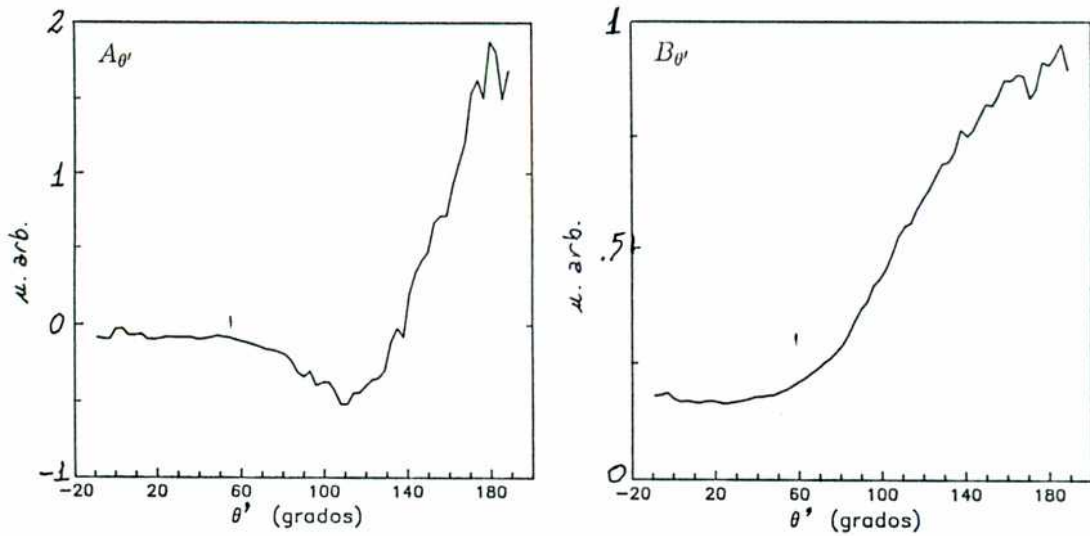


Figura 3.3: Funciones angulares $A_{\theta'}$ y $B_{\theta'}$ extraídas de la medición de $H^+ \rightarrow He$ a 100 keV. Fueron obtenidas utilizando un ajuste lineal en el rango $v' > 0.1$ au en cortes de Q/U_{00} para 60 valores de θ' .

3.3 Determinación de v_i

Para remover la divergencia hace falta calcular la función U_{00} :

$$U_{00}(\mathbf{v}) = \int S(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}) \frac{1}{|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_i|} d^3\mathbf{v}_1 \quad (3.8)$$

Al igual que con el método estándar, necesitamos conocer la función transmisión S y la velocidad del proyectil v_i . En adelante, modelaremos a S con una función de tipo escalón para la dependencia angular. Vamos a señalar con un asterisco a las variables que utilizaremos para calcular esta función U_{00} (θ_0^* , v_i^*), y así diferenciarlas de los verdaderos valores (θ_0 , v_i) de los cuales no tenemos un conocimiento lo suficientemente preciso. En esta sección presentamos el criterio que utilizamos para elegir v_i^* .

En primer lugar estudiamos el efecto de elegir erróneamente v_i^* . Construimos un pico con $v_i = 2$ au ($\theta_0 = 0.5^\circ$ y $R = 0.2\%$) de una estructura asimétrica muy simple:

$$F(\mathbf{v}) = U_{00}(\mathbf{v}) - 0.5 U_{01}(\mathbf{v}) \quad (3.9)$$

Realizamos el cociente F/U_{00} calculando el denominador con tres valores de v_i^* a $\theta = 0^\circ$. La variación de v_i^* es sólo de 0.25%. El resultado se muestra en la figura 3.4. Sólo si elegimos exactamente $v_i^* = v_i$ la curva que obtenemos es una transición suave y sin estructuras entre las rectas asíntotas que corresponden a las colas del pico. La forma de la estructura en $v' \approx 0$ nos indica si v_i^* es mayor o menor que v_i .

Con esta idea, realizamos el cociente Q/U_{00} para diferentes valores de v_i^* a $\theta = 0^\circ$ para la medición de $H^+ \rightarrow He$ a 100 keV (figura 3.5). El criterio que proponemos consiste en elegir aquella v_i^* con la que el cociente Q/U_{00} sea una transición suave entre las rectas asíntóticas. Aunque el pico originado por los electrones Rydberg entorpece el análisis, podemos de todas maneras buscar la suavidad de la transición al restarle esta pequeña estructura, en particular observando la región $v > v_i$ de los espectros.

En la figura 3.5(b) mostramos el resultado de nuestra elección de v_i^* . En la misma figura apreciamos el efecto de utilizar un valor de v_i^* ligeramente diferente. Hemos sombreado el pico de electrones Rydberg. A pesar de que la estructura angular del pico de ECC es bastante más compleja que el sencillo modelo de la función F , la analogía entre las figuras 3.4 y 3.5 justifica el criterio utilizado.

Este criterio para determinar v_i a partir de los datos experimentales, es cualitativo en su aplicación pero muy preciso en su resultado: podemos determinar la velocidad

del proyectil con un error menor que el 0.25%, *en forma independiente* del método que utilizamos para obtener las funciones angulares $A_{\theta'}$ y $B_{\theta'}$. El máximo del pico de ECC se encuentra en $v = 2.075$ au. Este valor se encuentra en el extremo inferior del intervalo de confianza con que estimamos v_i^* . La diferencia entre el máximo del pico de ECC y v_i se incrementa al aumentar la resolución angular.

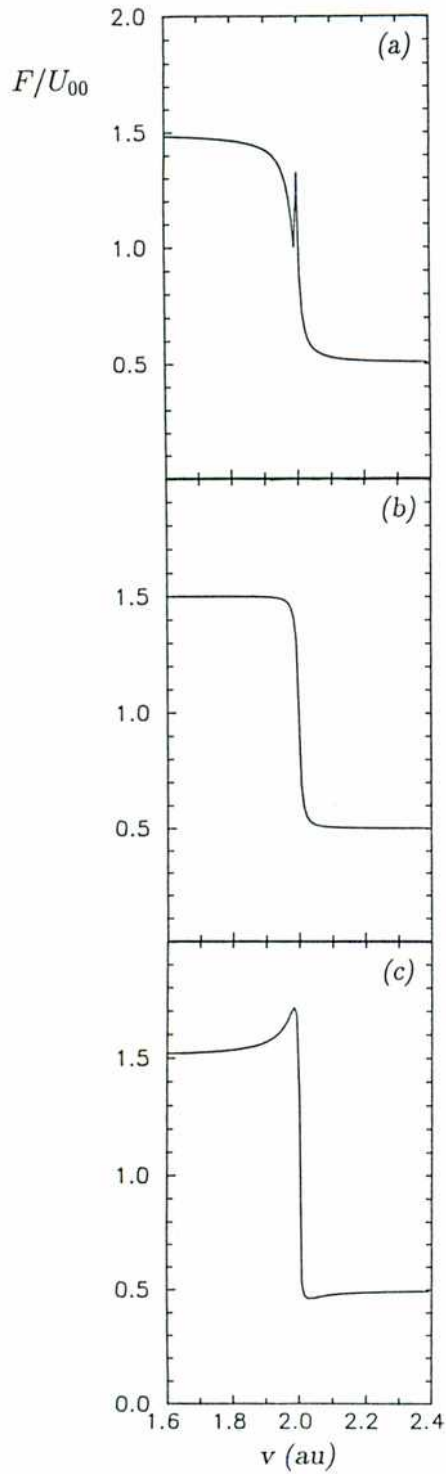


Figura 3.4: Cociente F/U_{00} a $\theta = 0^\circ$, donde $F = U_{00} - 0.5U_{01}$ calculada con $v_i = 2$ au, $\theta_0 = 0.5^\circ$ y $R = 0.2\%$.
 (a): $v_i^* = 1.995$ au.
 (b): $v_i^* = 2.000$ au.
 (c): $v_i^* = 2.005$ au.

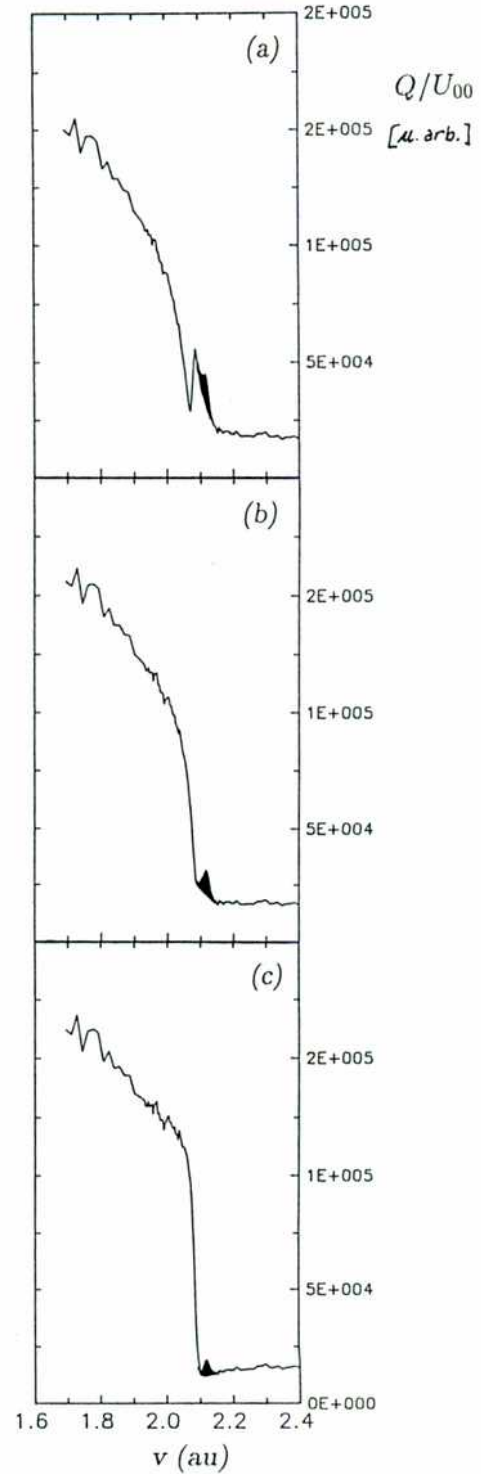


Figura 3.5: Cociente Q/U_{00} a $\theta = 0^\circ$ para la colisión $H^+ \rightarrow He$ a 100 keV.
 (a): $v_i^* = 2.070$ au.
 (b): $v_i^* = 2.085$ au; Valor elegido.
 (c): $v_i^* = 2.100$ au.

3.4 Estabilidad del Método

Vamos a estudiar ahora la estabilidad del método frente a variaciones en la elección de v_i^* y θ_0^* .

En la figura 3.6 observamos las variaciones en las funciones $A_{\theta'}$ y $B_{\theta'}$, producto de variar v_i^* entre los extremos del intervalo de confianza que obtuvimos en el ítem anterior ($\Delta v_i = \pm 0.25\%$), dejando fijo θ_0 . Observamos que las mayores desviaciones en las funciones angulares se encuentran hacia atrás y son del orden del 10%.

Comparando con el método estándar (figura 1.11), la variación de B_{01} (el parámetro de asimetría divergente) es del orden de un 20% ante una variación similar de v_i^* ($\pm 0.25\%$). Esta diferente sensibilidad se debe a que el método estándar pretende describir *todo* el espectro, aún el detalle de la región de $v' \approx 0$ que sufre fuertes variaciones al variar ligeramente v_i^* . Nuestro ajuste, en cambio, sólo pretende ajustar las colas de los espectros, que son mucho menos dependientes de la elección de v_i^* .

Por este mismo motivo, nuestro método es *prácticamente insensible* ante variaciones de θ_0^* , a diferencia del procedimiento estándar. La única variación que observamos en $A_{\theta'}$ y $B_{\theta'}$ consiste en un factor de normalización debido a que el cociente Q/U_{00} verifica una ley de escala de tipo $1/\mathcal{V} \propto (1/\theta_0^*)^2$ en las colas del espectro. En la figura 3.7 observamos el efecto de variar fuertemente θ_0^* en el cociente ‘normalizado’ $(Q/U_{00}) (\theta_0^*/\theta_0)^2$. Las colas del espectro no se alteran en absoluto a pesar que la variación de θ_0^* es mayor que el 100%.

La gran estabilidad de este método, que contrasta con la del procedimiento estándar, la hemos obtenido gracias a desechar (con un criterio claro y simple) aquellos puntos del espectro con $v' < 0.1$ au. Esta renuncia nos conduce a un resultado que contiene la información física del pico de ECC y que no depende de detalles desconocidos del sistema de detección.

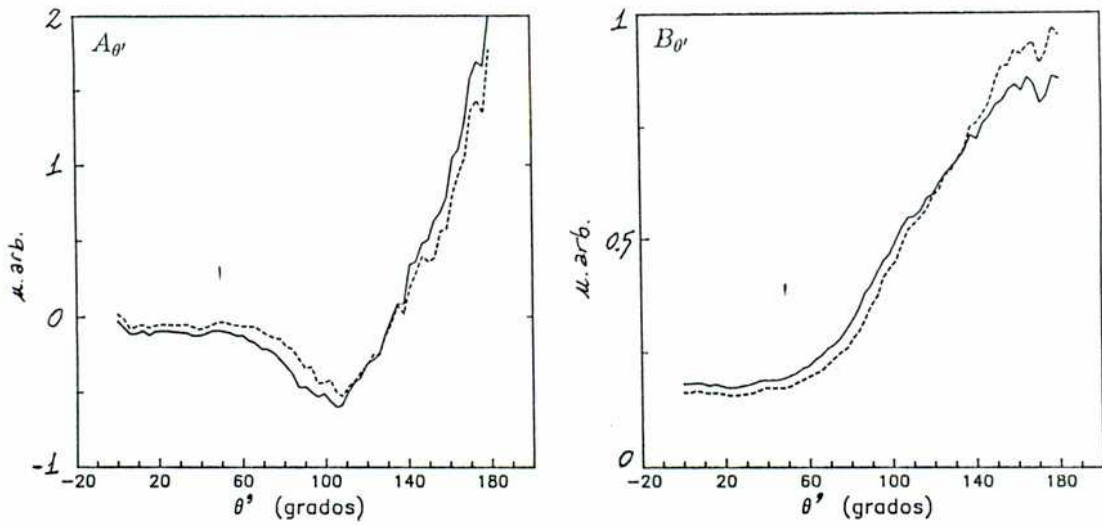


Figura 3.6: Variación de las funciones angulares frente a variaciones de v_i^* para la colisión $H^+ \rightarrow He$ a 100 keV.
 (—): $v_i^* = 2.080$ au. (---): $v_i^* = 2.090$ au.

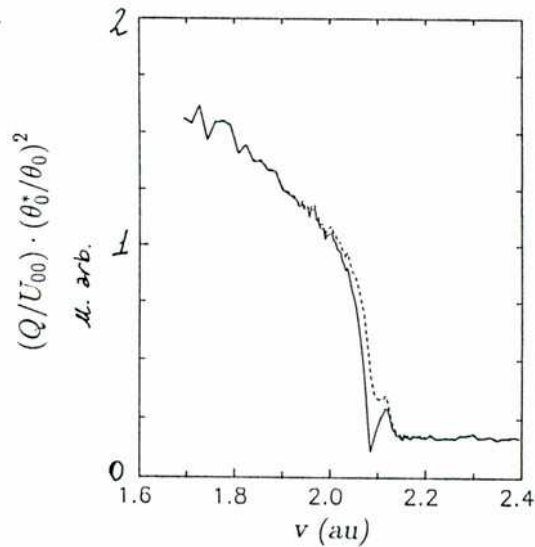


Figura 3.7: Variación del cociente 'normalizado' $(Q/U_{00}) (\theta_0^*/\theta_0)^2$ frente a variaciones de θ_0^* para la colisión $H^+ \rightarrow He$ a 100 keV.
 (—): $\theta_0^* = 0.2^\circ$. (---): $\theta_0^* = 0.8^\circ$.

3.5 Relación con otros Métodos

El desarrollo en funciones angulares es totalmente compatible con el desarrollo paramétrico del método estándar. Ambos son idénticos si retenemos sólo los términos con $n = 0$ y 1 en la ecuación 1.8 obtenemos:

$$\begin{aligned} B_{\theta'} &= \sum_{l=0}^{\infty} B_{0l} P_l(\cos \theta') \\ A_{\theta'} &= \sum_{l=0}^{\infty} B_{1l} P_l(\cos \theta') \end{aligned} \quad (3.10)$$

Tomando en cuenta la forma de la función $A_{\theta'}$ (figura 3.3), resulta que para describir razonablemente su estructura en términos de polinomios de Legendre, debemos incluir términos de $l \geq 5$, como veremos más adelante. La convergencia del desarrollo paramétrico tradicional es muy lenta y resulta artificial para describir la forma del pico de ECC.

Este tipo de desarrollo en funciones angulares había sido propuesto por Dahl (1985). Utiliza una expresión de la forma:

$$\frac{d\sigma}{dv} = \frac{1}{4\pi v'} \sum_{i=0}^{\infty} c_i \left(\frac{v'}{v_i} \right)^i W_i(\theta') \quad (3.11)$$

Salvo constantes las funciones angulares $W_1(\theta')$ y $W_0(\theta')$ son equivalentes a $A_{\theta'}$ y $B_{\theta'}$.

La idea de remover la divergencia fue utilizada algunas veces para graficar los resultados del fito (Andersen 1984, 1986, Dahl 1985, Knudsen 1986). Estos autores calculan la SEDD diferencial en energía en el sistema del proyectil, aprovechando que la relación:

$$\frac{d\sigma}{dE' d\Omega'} = v' \frac{d\sigma}{dv} \quad (3.12)$$

remueve la divergencia del pico de ECC.

En particular, Dahl grafica el cociente $(Q/V)v'$ y realiza un ajuste por rectas para $v' > 5v_i\theta_0$. En las colas del pico el cociente utilizado por Dahl es idéntico a Q/U_{00} . Sin embargo, los resultados de Dahl son incompletos por dos motivos:

- No posee una buena normalización angular de los datos. El autor describe cómo se aplicaría potencialmente el método, pero debe conformarse con aplicarlo sólo a sus mediciones de $\theta = 0^\circ$.

- Al trabajar con el cociente $(Q/\mathcal{V})v'$ se pierde *completamente* la información correspondiente a la región $v' \approx 0$ (nótese que el cociente tiende a 0), que es la región que nosotros utilizamos para determinar v_i . Dahl no explicita ningún criterio para la elección de v_i y dada la sensibilidad respecto de esta variable, sus resultados están afectados por esta indeterminación.

3.6 Normalización de las Funciones Angulares

Para comparar la forma de las funciones angulares correspondientes a diferentes sistemas y energías de colisión entre sí, resulta conveniente normalizar los resultados. Definimos al rendimiento del pico como el valor medio de la función angular divergente:

$$Y = \langle B_{\theta'} \rangle = \frac{1}{4\pi} \int B_{\theta'} d\Omega' \quad (3.13)$$

Esta definición coincide exactamente con el B_{00} del desarrollo paramétrico tradicional. Efectivamente, utilizando la relación 3.10 y reemplazando en nuestra definición de Y :

$$\begin{aligned} Y &= \frac{1}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} B_{0l} \int P_l(\cos \theta') d\Omega' \\ &= B_{00}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Este enfoque tiene la ventaja de no realizar ninguna hipótesis acerca de la estructura angular de $B_{\theta'}$.

Con esta definición de rendimiento del pico, podemos definir también las funciones angulares normalizadas:

$$\begin{aligned} a_{\theta'} &= A_{\theta'}/Y \\ b_{\theta'} &= B_{\theta'}/Y \end{aligned} \quad (3.15)$$

Entonces, la sección eficaz se expresa:

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{v}} = Y \left(\frac{b_{\theta'}}{v'} + a_{\theta'} \right) \quad (3.16)$$

Resulta obvio que por definición: $\langle b_{\theta'} \rangle = 1$.

Capítulo 4

Resultados y Conclusiones

— No es una buena historia —protestó Pilon—. Hay demasiados sentidos y demasiadas lecciones. Algunas son opuestas. No se puede conservar en la memoria. No demuestra nada.

— A mi me gusta —dijo Pablo—. Me gusta porque no tiene un significado claro y sin embargo parece que quiere decir algo, aunque no sé qué.

El sol había sobrepasado el mediodía y el aire era caluroso.

John Steinbeck, Tortilla Flat.

4.1 Resultados

Medimos la estructura de la SEDD en la proximidad del pico de ECC, con una resolución angular de $\theta_0 = 0.5^\circ$, para los sistemas $H^+ \rightarrow He$ a 50 keV, 100 keV y 200 keV así como para $He^{2+} \rightarrow He$ a 100 keV/amu. En la figura 4.1 mostramos las curvas de nivel de Q/v^3 (por la ecuación 1.15 es proporcional a $d\sigma/dv$ si nos apartamos lo suficiente del pico).

Aplicando el método descrito en el capítulo anterior, determinamos v_i^* para cada una de nuestras mediciones, obteniendo los valores de la tabla 4.1. Con los valores de v_i^* y utilizando $\theta_0^* = 0.5^\circ$ calculamos las funciones U_{00} correspondientes y realizamos los cocientes Q/U_{00} . Los resultados de las curvas de nivel se muestran en la figura 4.2.

Podemos observar que en todos los casos Q/U_{00} es prácticamente una constante sobre toda la región comprendida entre la dirección de incidencia y $\theta' \approx 90^\circ$.

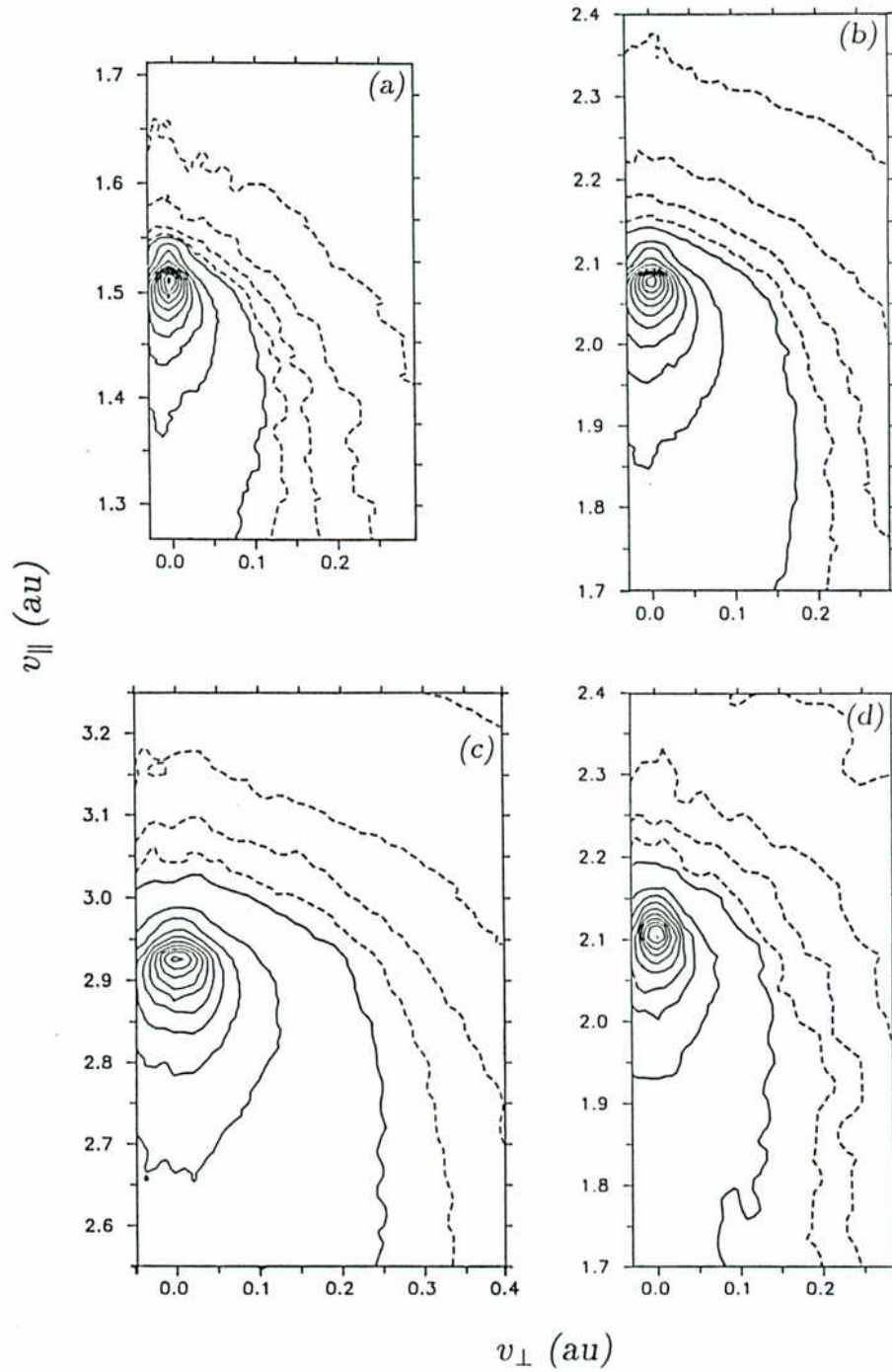


Figura 4.1: Curvas de nivel de Q/v^3 . Los niveles de las curvas llenas y punteadas corresponden a alturas de 1/10 y 1/50 de la altura total del pico, respectivamente. $v_{||}$ y v_{\perp} representan las componentes de la velocidad en la dirección de incidencia y su perpendicular respectivamente.
 Mediciones de $H^+ \rightarrow He$: (a): 50 keV; (b): 100 keV; (c): 200 keV.
 (d): $He^{2+} \rightarrow He$ 100 keV/amu.

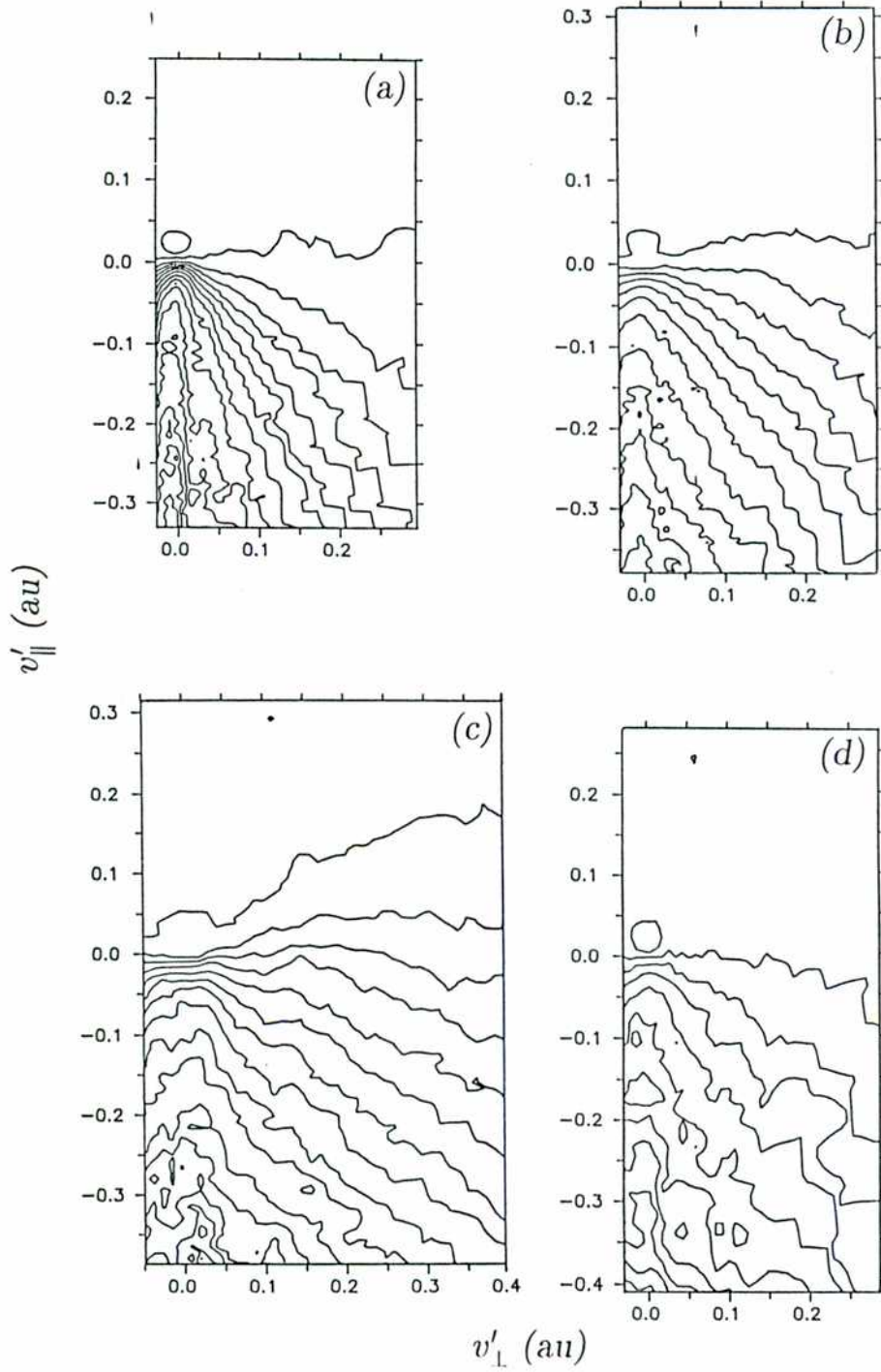


Figura 4.2: Curvas de nivel de Q/U_{00} . Los niveles están equiespaciados relativamente en una altura arbitraria. $v_{||}$ y v_{\perp} representan las componentes de la velocidad en la dirección de incidencia y su perpendicular respectivamente. Mediciones de $H^+ \rightarrow He$: (a): 50 keV; (b): 100 keV; (c): 200 keV. (d): $He^{2+} \rightarrow He$ 100 keV/anu.

Medición			$v_i^*_{[ua]}$	$Y_{(10^{-19}cm^2/eVsr)}$
H^+	$\rightarrow He$	50 keV	1.590	3.29
H^+	$\rightarrow He$	100 keV	2.085	1.32
H^+	$\rightarrow He$	200 keV	2.935	0.175
He^{2+}	$\rightarrow He$	100 keV/amu	2.115	5.65

Tabla 4.I: Valores obtenidos de v_i^* y Y .

Hacia la dirección de $\theta' = 180^\circ$ la función crece formando una cresta aguda. Esta cresta resulta más pronunciada al disminuir la velocidad de colisión v_i . Esta estructura no puede deberse a un efecto instrumental (por ejemplo del blanco extendido) ya que no se observa el mismo incremento a $\theta' = 0^\circ$.

Vamos a poder discutir cuantitativamente este comportamiento en términos del rendimiento Y así como de las funciones angulares $a_{\theta'}$ y $b_{\theta'}$ introducidas en el capítulo anterior.

4.1.1 El Rendimiento

Nuestras mediciones no son absolutas, pero están bien normalizadas relativamente. Hemos normalizado nuestros datos con la medición de $H^+ \rightarrow He$ a 100 keV realizada por Andersen *et al* (1986). De esta manera obtuvimos el resultado de la tabla 4.I. El error absoluto es de 30% (el del dato de Andersen *et al*) pero el error relativo entre nuestros datos es 5%.

Observamos que la dependencia en v_i sigue la tendencia de los resultados de otros autores (véase figura 1.6).

Si comparamos los rendimientos para las colisiones de $H^+ \rightarrow He$ y $He^{2+} \rightarrow He$ a 100 keV/amu obtenemos que la dependencia con la carga del proyectil es $Z_p^{2.10 \pm 0.07}$.

Como para la colisión $He^{2+} \rightarrow He$ a 100 keV/amu tenemos un valor de $\kappa = 2$ para el parámetro de Bohr (ecuación 1.16), nos hallamos lejos de la dependencia asintótica Z_p^3 . Nuestro resultado coincide con el valor obtenido por Vane *et al* (1978) ($Z_p^{2.2 \pm 0.2}$) para valores similares de κ , aunque la definición de rendimiento no es la misma (ver sección 1.1.4). También es consistente con la dependencia hallada por Andersen *et al* (1986) que mostramos en la figura 1.7.

4.1.2 La Función Angular Divergente $b_{\theta'}$

En la figura 4.3 observamos las funciones $b_{\theta'}$ que extrajimos de las mediciones.

Para el caso $H^+ \rightarrow He$ a 200 keV, la función tiene una forma aproximada $b_{\theta'} \approx 1 - 0.65 \cos \theta'$. Esto indica que a altas velocidades, la convergencia en l de los términos divergentes del desarrollo paramétrico (ecuación 1.8) es rápida: basta considerar los términos de hasta $l = 1$ para describir bien la parte divergente del pico.

Al disminuir la velocidad de la colisión¹, observamos una mayor variación de la función $b_{\theta'}$ entre la dirección hacia adelante y la dirección hacia atrás. Esto se debe a que la influencia del potencial residual del blanco es más importante para menores velocidades de colisión v_i , provocando una mayor asimetría del pico de ECC.

En la figura también se observa claramente que al disminuir v_i la forma de la función $b_{\theta'}$ se aparta cada vez más de una dependencia de tipo $1 - \beta \cos \theta'$: se hace cada vez más plana hacia adelante, teniendo una variación cada vez más brusca hacia atrás.

Al variar la carga del proyectil (figura 4.3b) observamos que la forma de la función es aproximadamente la misma, resultando ligeramente más simétrica aquella correspondiente a la carga más alta.

Comparamos nuestro resultado con el de los cálculos de CDW y CDW-EIS (Fainstein 1993) (figura 4.4). Como éstas son aproximaciones de alta energía, sólo realizamos la comparación para la colisión $H^+ \rightarrow He$ a 200 keV. Encontramos que la asimetría de la CDW es un 30% de la que encontramos en las mediciones. La aproximación CDW-EIS conduce a picos prácticamente simétricos.

¹La relación entre la energía de la colisión y la velocidad es aproximadamente $v_i [au] = \sqrt{E_{[keV/amu]} / 25}$

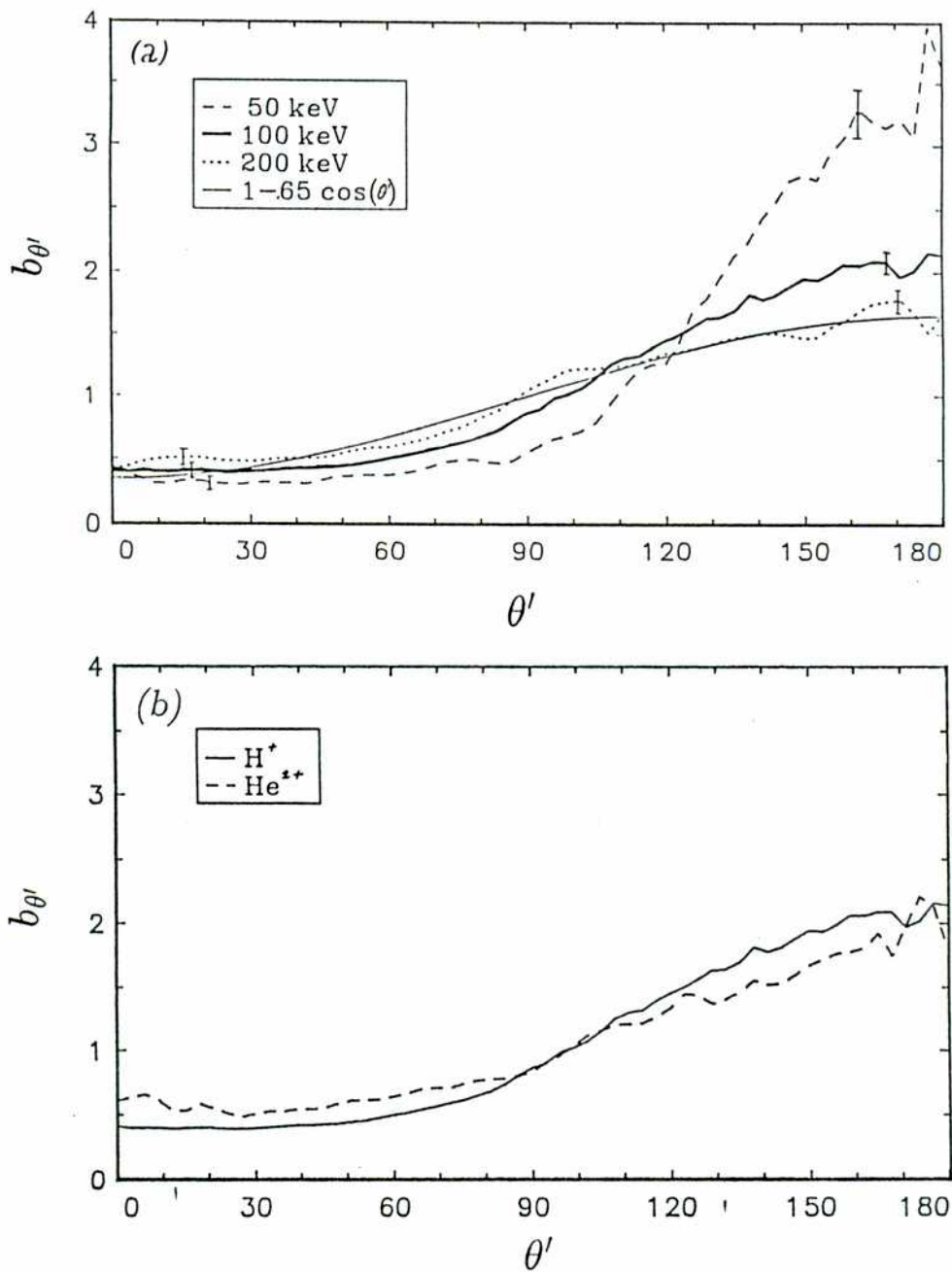


Figura 4.3: Resultados experimentales de la función angular divergente $b_{\theta'}$.
 (a): $H^+ \rightarrow He$, comparación a distintas velocidades. Para la curva de 200 keV indicamos el ajuste mediante la función $1 - 0.65 \cos \theta'$.
 (b): 100 keV/amu, diferentes proyectiles.

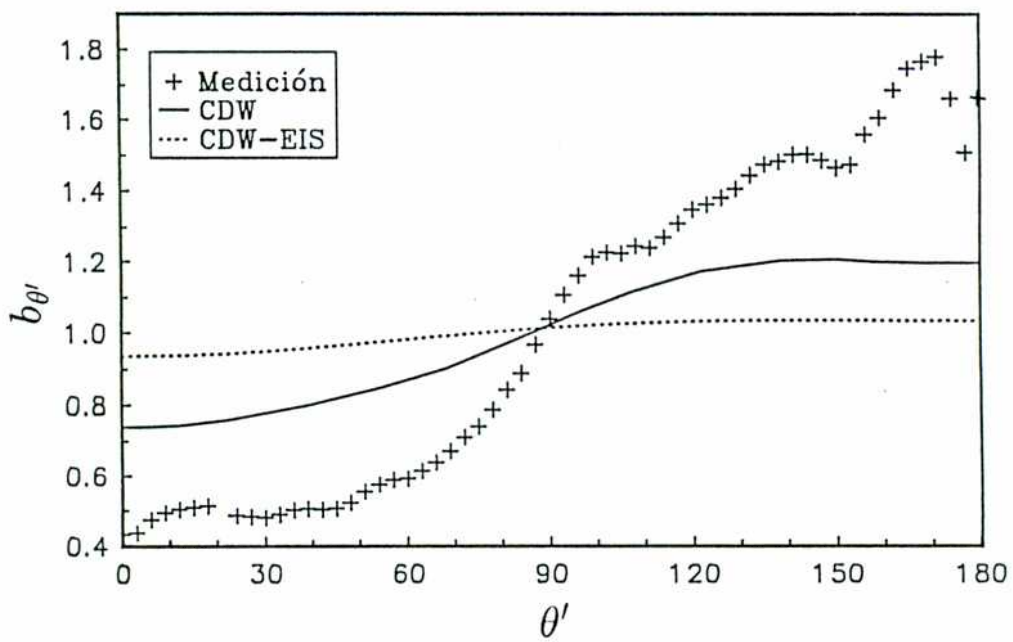


Figura 4.4: $b_{\theta'}$: Comparación con los cálculos (Fainstein 1993) para la colisión $H^+ \rightarrow He$ a 200 keV.

4.1.3 La Función Angular Convergente $a_{\theta'}$

En la figura 4.5 observamos las funciones $a_{\theta'}$ que obtuvimos a partir de las mediciones.

Todas ellas presentan el mismo comportamiento cualitativo: tienen un valor nulo y constante sobre un ancho cono hacia adelante ($0^\circ \leq \theta' \leq 80^\circ$), presentan una región negativa que abarca aproximadamente unos 50° y luego crecen rápidamente para tener un máximo agudo en la dirección $\theta' = 180^\circ$. Resulta muy artificial describir una función constante en casi todo el rango y con una variación abrupta muy localizada en términos de los polinomios de Legendre. Para la colisión $H^+ \rightarrow He$ a 50 keV, el valor de χ^2 se estabiliza recién para $l \geq 5$.

Si calculamos el valor medio

$$\langle a_{\theta'} \rangle = \frac{1}{4\pi} \int a_{\theta'} d\Omega' \quad (4.1)$$

observamos que en todos los casos es menor que el 6% del valor de la función a 180° . De esto se sigue que la función $a_{\theta'}$ no contribuye en forma significativa al número total de electrones emitidos.

Esto favorece la imagen de que la función $a_{\theta'}$ describe una alteración de la distribución electrónica, en la que el potencial del blanco concentra a los electrones en un cono hacia atrás, dejando sin perturbar aquellos que son emitidos a velocidades mayores que la del proyectil.

En la figura 4.5a, observamos la dependencia en v_i . Al disminuir la velocidad de colisión, la función $a_{\theta'}$ permanece constante hasta ángulos cada vez mayores. Además la cresta a $\theta' = 180^\circ$ se hace cada vez más abrupta y más concentrada hacia atrás.

Al variar Z_P no se aprecian variaciones significativas de la función $a_{\theta'}$.

Por la manera en que aparece $a_{\theta'}$ en la expresión 3.16 podemos pensar que representa un 'fondo' sobre el cual está montada la parte divergente de la SEDD. En la figura 4.6 graficamos la superficie definida por $a_{\theta'}$ en el espacio de velocidades.

Comparamos el resultado con las aproximaciones CDW y CDW-EIS para la colisión $H^+ \rightarrow He$ a 200 keV (Fainstein 1983)(figura 4.7a). En el caso de CDW-EIS obtenemos una función suave en todo el rango de θ' . En la aproximación CDW, en cambio, $a_{\theta'}$ es casi constante hacia adelante y con una cresta hacia atrás. La función es monótonamente creciente. Este comportamiento es similar al que observamos en los experimentos, salvo que a $\theta' = 0^\circ$ la curva teórica no va a 0 sino a un valor negativo. Si calculamos a diferentes velocidades, el resultado de CDW tiene el mismo compor-

tamiento que las mediciones (figura 4.7b): al disminuir v_i , a_{θ} se hace progresivamente plana hacia adelante y con una cresta más pronunciada hacia atrás. La función no tiene el mínimo que observamos en las mediciones.

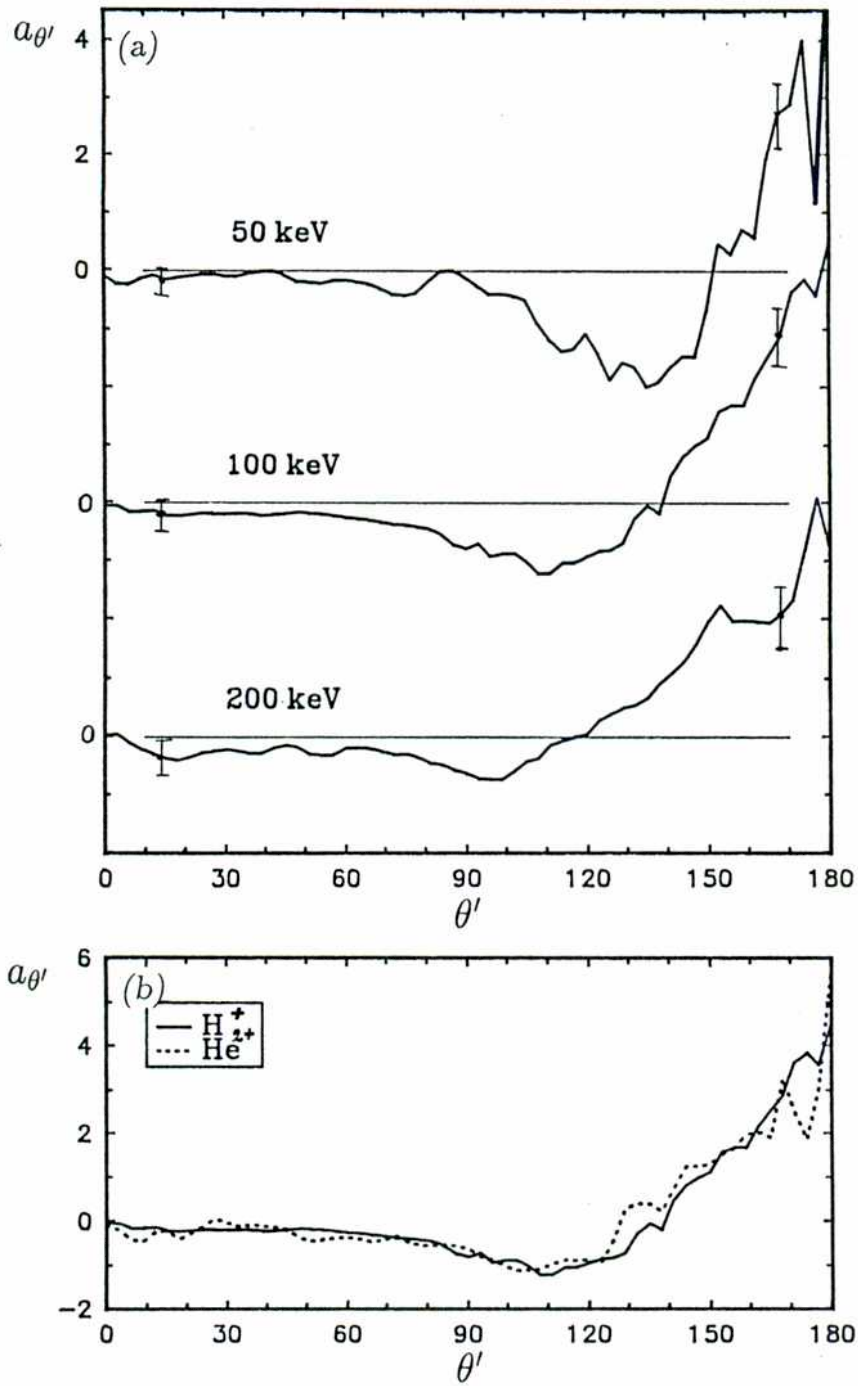


Figura 4.5: Resultados experimentales de la función angular convergente $a_{\theta'}$.
 (a): $H^+ \rightarrow He$, comparación a distintas velocidades.
 (b): 100 keV/amu, diferentes proyectiles.

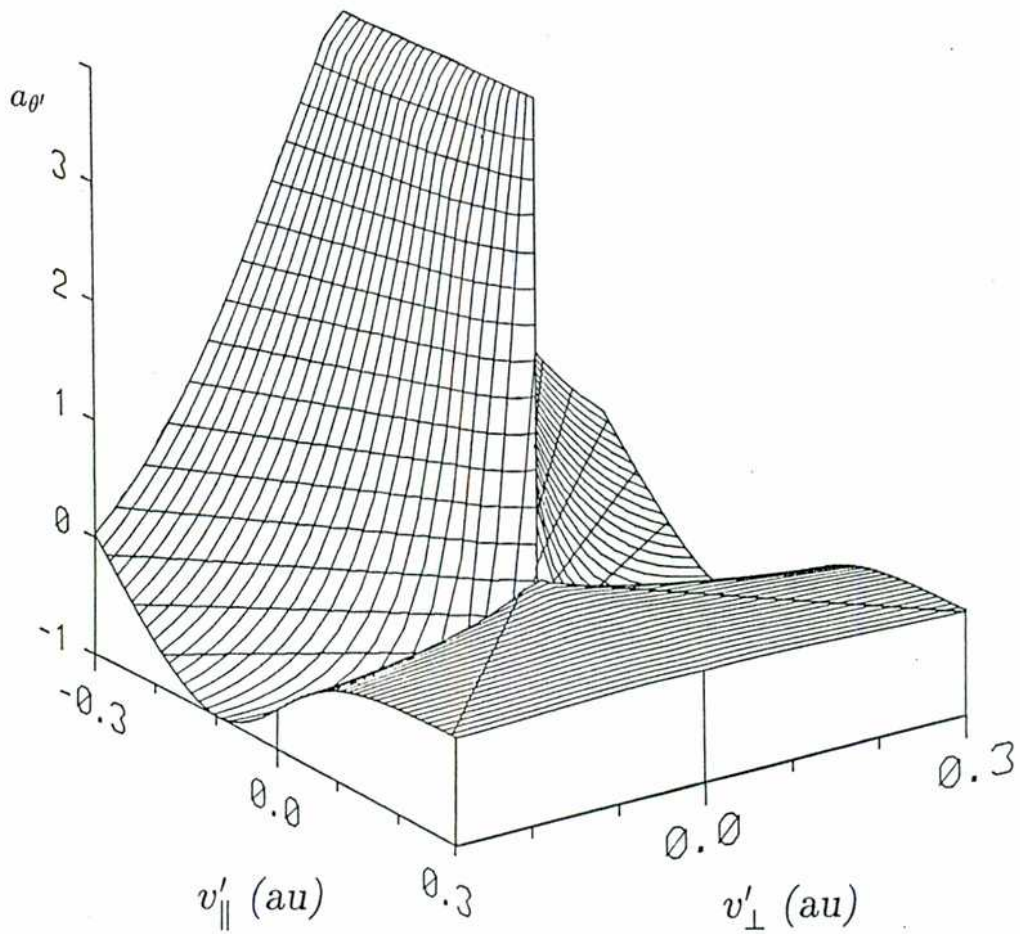


Figura 4.6: Superficie definida por la función $a_{\theta'}$ en el espacio de velocidades. Utilizamos el resultado experimental de $H^+ \rightarrow He$ a 100 keV, convenientemente suavizado. La función está multivaluada en $\mathbf{v}' = 0$.

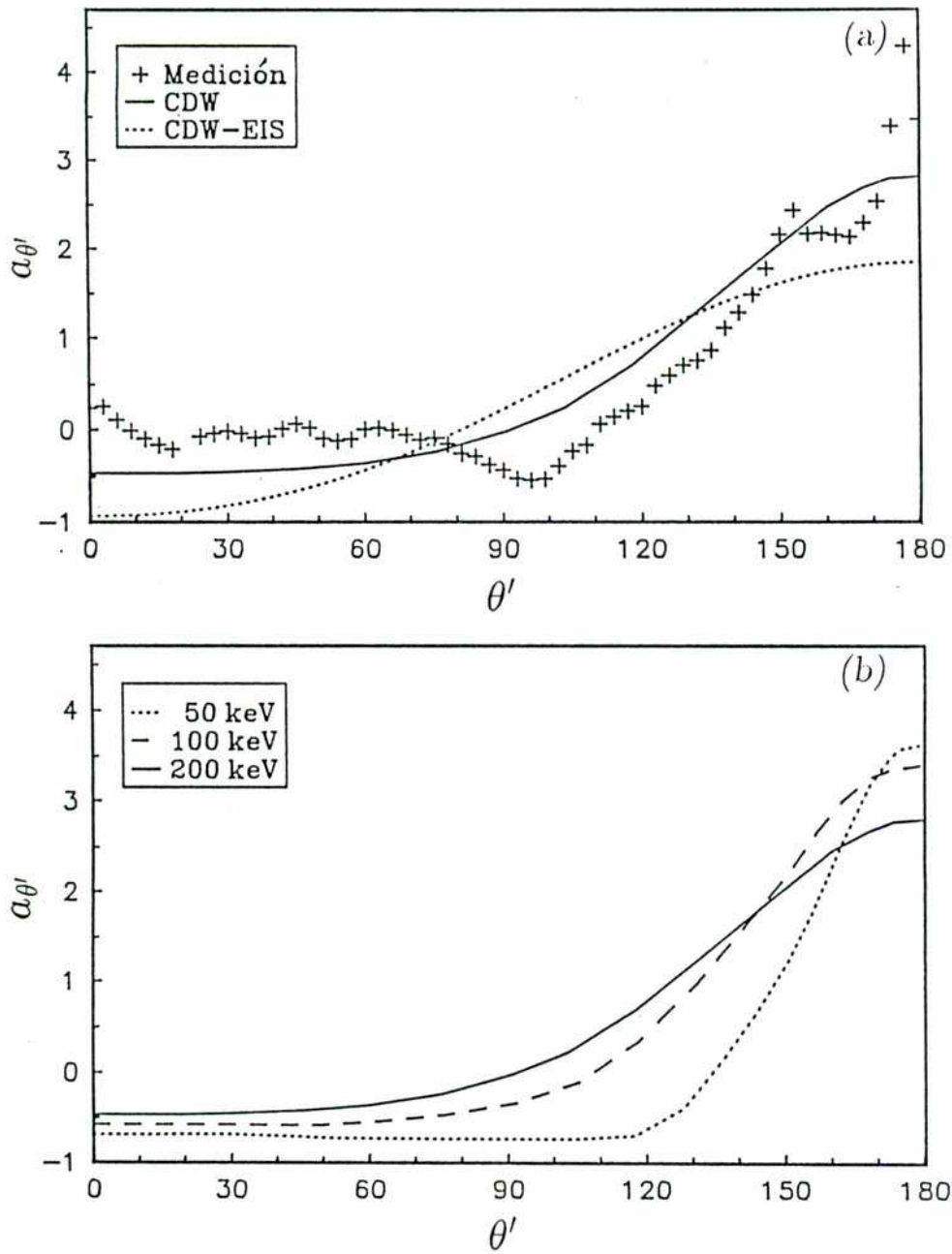


Figura 4.7: $a_{\theta'}$: Resultados de los cálculos (Fainstein 1993).
 (a): $H^+ \rightarrow He$ a 200 keV, comparación con la medición.
 (b): $H^+ \rightarrow He$, aproximación CDW. Dependencia con v_i .

4.1.4 Reconstrucción de la SEDD

Suavizando nuestros resultados de las funciones angulares y utilizando la expresión 3.16 podemos reconstruir la forma completa y deconvolucionada de la SEDD. En la figura 4.8 mostramos las líneas de nivel así obtenidas.

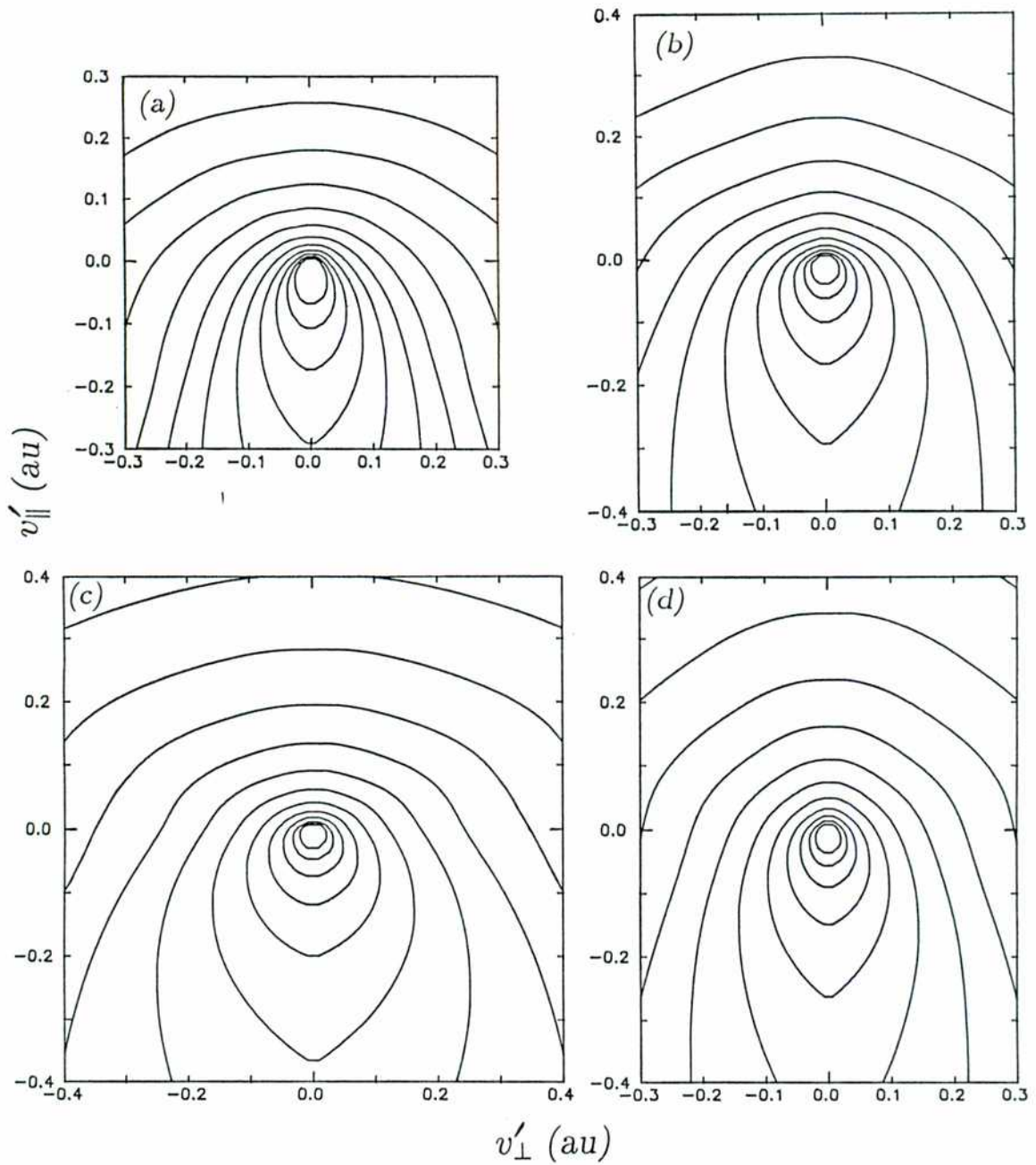


Figura 4.8: Curvas de nivel de la sección eficaz 'normalizada' $d\sigma_N/dv = a_{\theta'} + b_{\theta'}/v'$ obtenidas a partir de un suavizado de los resultados experimentales. Los niveles se encuentran logarítmicamente equiespaciados y corresponden a las alturas: $\ln d\sigma_N/dv = 0.0, 0.4, 0.8, \dots, 4.0$.
 (a): 50 keV; (b): 100 keV; (c): 200 keV.
 (d): $He^{2+} \rightarrow He$ 100 keV/amu.

4.2 Conclusiones

La forma del pico de ECC constituye una información importante para estudiar la evolución de un electrón sometido a dos potenciales coulombianos. A partir del trabajo de Shakeshaft y Spruch (1978a) y de la introducción del desarrollo paramétrico estándar por Meckbach, Nemirovsky y Garibotti (1981) se realizaron numerosos esfuerzos para caracterizar cuantitativamente la asimetría del pico de ECC, con dispares resultados. En el capítulo 1, hemos señalado que los problemas que involucra el método estándar son:

- Dependencia de los parámetros respecto de la extensión del fiteo.
- El truncado de la serie.
- La determinación de la transmisión del equipo.
- La determinación de la velocidad del proyectil.

Para relevar completamente la estructura del pico de ECC resulta indispensable medir espectros con ángulos próximos a 0° y no sólo en la dirección de incidencia. Las contadas mediciones que se realizaron con estas características, presentan inconvenientes en la normalización angular de los espectros, debidos a defectos instrumentales o al efecto de blanco extendido. Nosotros resolvimos estos inconvenientes mediante un adecuado diseño y ajuste del equipo, así como de un exhaustivo procedimiento para relevar la estructura de la SEDD, verificando la consistencia de los datos obtenidos.

Para analizar la estructura del pico de ECC a partir de las mediciones, propusimos un desarrollo en funciones angulares, el método de remoción de la divergencia y el ajuste por rectas. Este enfoque presenta las siguientes ventajas:

- No resulta necesario hacer hipótesis injustificadas acerca de la estructura de la SEDD. La necesidad y suficiencia de los dos términos de la expresión 3.16 queda demostrada al observar que los cortes de la función Q/U_{00} son efectivamente rectas.
- El fiteo es realizado con rectas. Podemos verificar a simple vista la calidad del resultado.

- Las funciones angulares obtenidas son independientes de la modelización que realicemos de la función transmisión del espectrómetro.
- El criterio que presentamos para elegir v_i^* resulta muy preciso y es *independiente* de la bondad del ajuste por rectas. Así se abre el círculo vicioso que implica escoger v_i^* para ajustar la medición con la descripción matemática propuesta y finalmente aceptar tanto v_i^* como la descripción, apelando a la consistencia interna del resultado.
- Las funciones angulares $a_{\theta'}$ y $b_{\theta'}$ son directamente comparables con los resultados de modelos teóricos.
- Estructuras adicionales, como la producida por los electrones Rydberg que se ionizan en el campo del analizador, no perturban el resultado.

De las curvas que obtuvimos para las funciones angulares $a_{\theta'}$ y $b_{\theta'}$ en la medición de menor energía ($H^+ \rightarrow He$ 50 keV) se distinguen claramente dos regiones:

- **Región I:** Electrones emitidos con $v > v_i$ ($\theta' < 90^\circ$)
En esta zona resulta que $a_{\theta'} \approx 0$ y $b_{\theta'} \approx cte$. Entonces, la sección eficaz es de la forma $d\sigma/dv \propto 1/v'$ que coincide con la de un electrón que en el estado final evoluciona sometido sólo al potencial coulombiano del proyectil.
- **Región II:** Electrones emitidos con $v < v_i$ ($\theta' > 90^\circ$)
En esta zona hay un brusco incremento en la producción de electrones, que denota la influencia del potencial del blanco. En particular la parte convergente $a_{\theta'}$ presenta una cresta aguda en $\theta' = 180^\circ$.

Al aumentar la energía, el comportamiento en ambas regiones se va diluyendo en distribuciones angulares progresivamente isotrópicas.

En cuanto a la dependencia con la carga del proyectil, observamos que la parte divergente del pico se hace más simétrica al aumentar Z_P . Este comportamiento se corresponde con la idea de que la influencia del potencial residual del blanco tiene menor importancia relativa al aumentar la interacción del electrón con el proyectil. No detectamos variaciones en la parte convergente del pico al cambiar Z_P .

El resultado es consistente con la separación en dos regímenes de la ionización propuesta por Bandarage y Parson (1990) (véase sección 1.3.3). En primer lugar la

divisoria entre las regiones del espacio de velocidades que corresponden a cada régimen coinciden con las que encontramos experimentalmente. Además, según el modelo, en la región I los electrones son ionizados con $v > v_i$ en el momento de máximo acercamiento entre el proyectil y el blanco. En su evolución posterior, se ubicarán delante del proyectil y mucho más lejos del blanco, lo que resulta consistente con la forma de la SEDD que encontramos en la región I. Por último en la región II, los electrones evolucionan siempre entre el proyectil y el blanco, lo que concuerda con la estructura concentrada en $\theta' = 180^\circ$ que observamos en esta zona.

Los resultados del cálculo con CDW-EIS conducen a picos cuya parte divergente es prácticamente simétrica y la parte convergente no describe cualitativamente los resultados experimentales. La aproximación CDW subestima la asimetría divergente pero da una imagen bastante correcta de la función convergente $u_{\theta'}$, aunque no da cuenta del mínimo negativo que precede al incremento hacia atrás de la función angular. Resulta sorprendente que un cambio del estado inicial (que es la diferencia entre ambas aproximaciones) produzca variaciones cualitativas tan fuertes en una región del espacio de velocidades donde la interacción del electrón con el proyectil en el estado final sería dominante.

Han transcurrido 22 años desde la primer medición del pico de ECC. El tema ha despertado gran interés en los '80 y sin embargo quedaron sin responder las preguntas más elementales acerca de la forma del pico, desde el punto de vista teórico como experimental. Hemos demostrado las ventajas de nuestro método y hemos obtenido resultados novedosos. Esto permite una visión crítica de lo que se ha realizado hasta hoy. Un nuevo camino para enfrentar un viejo problema.

Agradecimientos

¿Por qué, a ciertas horas, es tan necesario decir: "Amé esto"? Amé unos blues, una imagen en la calle, un pobre río seco del norte. Dar testimonio, luchar contra la nada que nos barrerá. Así quedan todavía en el aire del alma esas pequeñas cosas, un gorrioncito que fue de Lesbia, unos blues que ocupan en el recuerdo el sitio menudo de los perfumes, las estampas y los pisapapeles.

Julio Cortázar, Rayuela.

Agradezco profundamente a quienes me alentaron y supieron darme confianza. A quienes con su colaboración desinteresada contribuyeron a que esta tesis llegara a buen fin. Agradezco también a aquellos entrañables amigos con los que hemos compartido tan buenos momentos. Quiero dar también las gracias al Instituto Balseiro, por crear un ambiente propicio para desarrollar a gusto la enseñanza de la Física.

Agradecimientos

Referencias

- Abramowitz M y Stegun I A 1970 '*Handbook of Mathematical Functions*'. Dover Pub., Inc. (Nueva York)
- Abrines R y Percival I C 1966 *Proc. Phys. Soc.* **88** 861
- Andersen L H, Frost M, Hvelplund P y Knudsen H 1984 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **17** 4701
- Andersen L H, Jensen K E y Knudsen H 1986 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **19** L161
- Atan H, Steckelmacher W y Lucas M W 1990 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23** 2579
- Band Y B 1974 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **7** 2557
- Bandarage G y Parson R 1990 *Phys. Rev. A* **41** 5878
- Barrachina R O y Macek J 1989 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** 2151
- Barrachina R O y Garibotti C R 1983 *Phys. Rev. A* **28** 1821
- Barrachina R O 1990 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23** 2321
- Bates D R y Griffing G 1953 *Proc. Roy. Soc.* **A66** 961
- Belkić Dž, Gayet R y Salin A 1979 *Phys. Rep.* **56** 279
- Belkić Dž 1978 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **11** 3529
- Bernardi G, Nemirovsky I B, Meckbach W y Garibotti C R 1984 '*Forward Electron Ejection in Ion Collisions*'. *Lecture Notes in Physics* **213** 67. Springer-Verlag (Berlín) – Groeneveld K O, Meckbach W y Sellin I A (eds)
- Bernardi G, Suárez Š, Focke P y Meckbach W 1988 *Nucl. Instrum. Meth.* **B33** 321
- Berry S D, Glass G A, Sellin I A, Groeneveld K O, Hofmann D, Andersen L H, Breinig M, Elston S B, Engar P, Shauer M M, Stolterfoht N, Schmidt-Böcking H, Nolte G y Schiwietz G 1985 *Phys. Rev. A* **31** 1392
- Bethe H 1930 *Ann. Phys* **5** 325
- Bohr N 1948 *K Danske Vidensk Selsk Mat-Fys Medd* **28** No. 7

- Bonsen T F y Vriens L 1970 *Physica* **47** 307
- Bonsen T F y Banks D 1971 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **4** 706
- Brauner M y Macek J 1992 *Phys. Rev. A* **46** 2519
- Breinig M, Elston S, Sellin I, Liljeby L, Thoe R, Vane C, Gould II, Marrus R y Laubert R 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 1689
- Breinig M, Elston S, Huldt S, Liljeby L, Vane C, Berry S, Glass G, Schauer M, Sellin I, Alton G, Datz S, Overbury S, Laubert R y Suter M 1982 *Phys. Rev. A* **25** 3015
- Brinkman H C y Kramers H A 1930 *Proc. K. Ned. Akad. Ned.* **33** 973
- Brinkmann R T y Trajmar S 1981 *J. Phys. E: Sci. Instrum.* **14** 245
- Burgdörfer J 1983 *Z. Phys. A* **309** 285
- Burgdörfer J 1984 'Forward Electron Ejection in Ion Collisions'. Lecture Notes in Physics **213** 32. Springer-Verlag (Berlín) – Groeneveld K O, Meckbach W y Sellin I A (eds)
- Burgdörfer J 1986 *Phys. Rev. A* **33** 1578
- Chan F T y Eichler J 1979 *Phys. Rev. A* **20** 367
- Cheshire I M 1964 *Proc. Phys. Soc.* **84** 89
- Chew G F 1950 *Phys. Rev.* **80** 196
- Chiu K C R, McGowan J Wm y Mitchell J B A 1978 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **11** L117
- Chiu K C R, Meckbach W, Sanchez Sarmiento G, McGowan J Wm 1979 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **12** L147
- Cleff B y Melhorn W 1974 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **7** 605
- CNEA 1964 'Memoria Anual' 76
- Corchs S E, Dubé L J, Maidagan J M, Rivarola R D y Salin A 1992 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25** 2027
- Cranage R W y Lucas M W 1976 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **9** 445
- Crooks G y Rudd M 1970 *Phys. Rev. Lett.* **25** 1599
- Crothers D S F 1982 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15** 2061
- Crothers D S F 1983 *Phys. Scr.* **T3** 236
- Crothers D S F y McCann J F 1983 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **16** 3229
- Dahl P 1985 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **18** 1181
- Dettmann K, Harrison K G y Lucas M W 1974 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **7** 269
- Drisko R M 1955 tesis - Carnegie Institute of Technology (sin publicar)

- Dubé L J y Salin A 1987 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20** L499
- Duncan M M y Menendez M G 1976 *Phys. Lett.* **56A** 177
- Duncan M M, Menendez M G, Eisele F L y Marek J 1977 *Phys. Rev. A* **15** 1785
- Elston S B, Berry S D, Burgdörfer J, Sellin I A, Steinig M, DeSerio R, González Lepera C E, Liljeby L, Groeneveld K O, Hofmann D, Koschar P y Nemirovsky I B 1985 *Phys. Rev. Lett.* **55** 2281
- Elston S B 1987 *Nucl. Instrum. Meth.* **B24/25** 214
- Enge H A 1967 *'Focusing of Charged Particles'* **2** 203. Academic Press (Nueva York) – Septier A (ed)
- Faddeev L D 1960 *Zh. Eksperim. i Teor. Fiz.* **39** 1459 [*Sov. Phys.-JETP* **12** 1014 (1961)]
- Fano U y Macek J 1973 *Rev. Mod. Phys.* **43** 553
- Fainstein P D, Ponce V H y Rivarola R D 1990 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23** 1481
- Fainstein P D, Ponce V H y Rivarola R D 1991 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24** 3091
- Fainstein P D 1993 *Comunicación privada*
- Garibotti C R y Miraglia J E 1980 *Phys. Rev. A* **21** 572
- Garibotti C R y Barrachina R O 1983a *Phys. Rev. A* **28** 2792
- Garibotti C R y Barrachina R O 1983b *Lett. Nuov. Cimento* **36** 583
- Gillespie J 1964 *'Final State Interactions'* Holden-Day (San Francisco)
- Goñi A R, Suárez S, Focke P, Bernardi G C y Meckbach W 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57** 1548
- Groeneveld K O, Meckbach W, Sellin I A y Burgdörfer J 1984 *Comments Atom. Mol. Phys.* **14** 187
- Gulyás L, Szabó Gy, Berényi D, Kövér Á, Groeneveld K O, Hofmann D y Burkhard H 1986 *Phys. Rev. A* **34** 2751
- Gulyás L, Szabó Gy, Kövér Á, Berényi D, Heil O y Groeneveld K O 1989 *Phys. Rev. A* **39** 4414
- Gulyás L, Kövér Á, Szabó Gy, Vajnai T y Berényi D 1990 *'High-Energy Ion-Atom Collisions'*. Lecture Notes in Physics **376** 56. Springer-Verlag (Berlín) – Berényi D y Hock G (eds)
- Harrison K G y Lucas M W 1970 *Phys. Lett.* **33A** 142

- Jackson J D y Schiff H 1953 *Phys. Rev.* **89** 359
- Jakuba β a-Amudsen D H 1990 *XVI ICPEAC - Nueva York Charlas Invitadas* 358
- Knudsen H, Andersen L y Jensen K 1986 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **19** 3341
- Kövér Á, Varga D, Szabó Gy, Berényi D, Kádár I, Ricz S, Végh J y Hock G 1983 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **16** 1017
- Kövér Á, Szabó Gy, Berényi D, Gulyás L, Cserny I, Groeneveld K O, Hofmann D, Koschar P y Burkhard M 1986 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **19** 1187
- Kuyatt C E y Jorgensen T 1963 *Phys. Rev.* **130** 1444
- Kuyatt C E 1968 *'Methods of Experimental Physics'* **7A** 1. Academic Press (Nueva York) - Benderson B y Fite W L (eds)
- Lucas M W, Steckelmacher W, Macek J y Potter J E 1980 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **13** 4833
- Macek J 1970 *Phys. Rev. A* **1** 235
- Macek J y Shakeshaft R 1980 *Phys. Rev. A* **22** 1441
- Macek J, Potter J E, Duncan M M, Menendez M G, Lucas M W y Steckelmacher W 1981 *Phys. Rev. Lett.* **46** 1571
- Massey H S W y Mohr C B O 1933 *Proc. Roy. Soc.* **140** 613
- McDowell M R C y Coleman J P 1970 *'Introduction to the theory of Ion-Atom collisions'*. North-Holland Pub. Co. (Londres)
- Meckbach W, Chiu K C R, Brongersma H H y McGowan Wm 1977 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **10** 3255
- Meckbach W, Nemirovsky I y Garibotti C 1981 *Phys. Rev. A* **24** 1793
- Menendez M G, Duncan M M, Eisele F L y Junker B R 1977 *Phys. Rev. A* **15** 80
- Miraglia J E y Macek J 1991 *Phys. Rev. A* **43** 5919
- Moiseiwitsch B L 1991 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24** 983
- Mosconi S 1991 *Trabajo Especial - Instituto Balseiro* (sin publicar)
- Nemirovsky I B, Meckbach W y Focke P 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1015
- Nesbet R K 1980 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **13** L193
- Oldham W 1967 *Phys. Rev.* **161** 1
- Olson R E y Salop A 1977 *Phys. Rev. A* **16** 531
- Oswald W, Schramm R y Betz H D 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 1114
- Pregliasco R y Barrachina R 1993 *A ser publicado*
- Reinhold C O y Olson R E 1989 *Phys. Rev. A* **39** 3861

- Risley J S 1972 *Rev. Sci. Instr.* **43** 95
- Rødbro M y Andersen F D 1979 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **12** 2883
- Rudd M E y Jorgensen T 1963 *Phys. Rev.* **131** 666
- Rudd M E, Sauter C A y Bailey 1966 *Phys. Rev.* **151** 20
- Rudd M E, Macek J 1972 *Case studies in Atomic Physics vol 3.* pgs 47-136. North Holland Publ. Co. – Mc Daniel y Mc Dowell (eds)
- Salin A 1969a *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **2** 631
- Salin A 1969b *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **2** L1255
- Salin A 1972 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **5** 979
- Salin A 1987 'High Energy Ion-Atom Collisions'. *Lecture Notes in Physics* **294** 245. Springer-Verlag (Berlín) – Berényi D y Hock G (eds)
- Sarkadi L, Pálinkás J, Kövér Á, Berényi D y Vajnai T 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 527
- Schramm R y Betz H D 1992 *Nucl. Instrum. Meth.* **B67** 146
- Shakeshaft R 1974 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **7** 1059
- Shakeshaft R y Spruch L 1978a *Phys. Rev. Lett.* **41** 1037
- Shakeshaft R y Spruch L 1978b *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **11** L457
- Shakeshaft R y Spruch L 1979a *Rev. Mod. Phys.* **51** 369
- Shakeshaft R y Spruch L 1979b *Phys. Rev. A* **20** 376
- Steckelmacher W, Strong R Y Lucas M W 1978 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **11** 1553
- Suárez S, Meckbach W, Bernardi G C y Focke P 1988 *Z. Phys. D* **7** 309
- Suter M, Vane C R, Sellin I A, Elston S B, Alton G D, Thoe R S y Laubert R 1978 *Phys. Rev. Lett.* **41** 399
- Swenson J K, Havener C C, Stolterfoht N, Sommer K y Meyer F W 1989 *Phys. Rev. Lett.* **63** 35
- Taulbjerg K, Barrachina R y Macek J 1990 *Phys. Rev. A* **41** 207
- Taylor J R 1972 'Scattering Theory'. J. Wiley & Sons, Inc. (Nueva York)
- Thomas L H 1927a *Proc. Camb. Phil. Soc.* **23** 713
- Thomas L H 1927b *Proc. R. Soc.* **A114** 561
- Thomson J J 1912 *Phil. Mag.* **23** 449
- Thonemann P C 1946 *Nature* **158** 61
- Toburen L H 1971 *Phys. Rev.* **3** 216
- Vager Z, Zabransky B J, Schneider D, Kanter E P, Gu Yuan Zhuang y Gemmell D S 1982 *Phys. Rev. Lett.* **48** 592

- Vager Z, Zabransky B J, Schneider D, Kanter E P, Gu Yuan Zhuang y Gemmell D S
1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1017
- Vainshtein L, Presnyakov L y Sobelman I 1964 *Phys. JETP* **18** 1383
- Vane C R, Sellin I A, Suter M, Alton G D, Elston S B, Griffin P M y Thoe R S 1978
Phys. Rev. Lett. **40** 1020
- Vidal R, Focke P, González Lepera E, Nemirovsky I B y Meckbach W 1983 *XIII
ICPEAC - Berlín* Libro de resúmenes 376
- Volz D J y Rudd M E 1970 *Phys. Rev. A* **2** 1395